

Kétdimenziós kvantumrendszerek nanoszerkezetekben

Cserti József

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

MTA Doktori értekezés

2008.

Apám és középiskolai fizikatanárom emlékére

Tartalomjegyzék

Bevezetés	1
1. Normál-szupravezető hibrid rendszerek	3
1.1. Andreev-reflexió	3
1.2. Kvantummechanikai leírás	7
1.2.1. Szeparálható rendszerek	8
1.2.2. Nem szeparálható rendszerek	9
1.3. Szemiklasszikus leírás	10
1.4. Eredmények	12
1.4.1. Szeparálható rendszerek	12
1.4.2. Integrálható rendszerek	14
1.4.3. Pszeudo-integrálható rendszerek	15
1.4.4. Kaotikus rendszerek	16
1.5. Normál-szupravezető diszk rendszer mágneses térben	19
1.6. Ferromágneses-normál és szupravezető hibrid rendszerek	23
2. Spintronika	27
2.1. A spintronika alapjai	27
2.2. Rashba-biliárdok	34
2.2.1. A szabad tér Green-függvénye Rashba-biliárdokra	35
2.2.2. A Weyl-formula területi és kerületi tagja tetszőleges alakú Rashba-biliárdra	39
2.2.3. Kör alakú Rashba-biliárd egzakt Green-függvénye	41
2.2.4. A Weyl-formula korrekciója kör alakú Rashba-biliárdra	42
2.2.5. Kitekintés	48
2.3. Spinfüggő szórás	50
3. A grafén	59
3.1. A grafén fizikájának alapjai	59
3.1.1. A grafén sáv szerkezete	61
3.1.2. Effektív Hamilton-operátor közelítés	65
3.1.3. Királis alagutazás, a Klein-paradoxon	68
3.1.4. Dirac-fermion mágneses térben, anomális kvantum Hall-effektus	73
3.1.5. Minimális vezetőképesség	74
3.2. Elektron-optika grafénben	78
3.3. Minimális vezetőképesség egy- és kétrétegű grafénben Kubo-formulával	84
3.4. Kígyóállapotok grafénben	91

Konkluzió	97
Köszönetnyilvánítás	101
Saját publikációk	103
Irodalomjegyzék	107

Bevezetés

Az utóbbi években a félvezetőiparban tapasztalható látványos technológiai fejlődés révén már elő tudnak állítani néhány száz nm méretű mintákat. Az elektronok mozgását előre megtervezhető módon lehet korlátozni olyan kis méretű tartományokra, amelyekben a mozgás kvantumos jellege alapvető szerepet kap. Az ilyen szerkezetek előállítási módját *nanotechnológiának* nevezik, az így készült eszközöket *nanoszerkezeteknek* vagy *mezoszkopikus* rendszereknek hívják. Összeillesztve például GaAs és AlGaAs félvezető rétegeket, a határfelületen az elektronok mozgása a határfelületre merőleges irányban elhanyagolható a határfelületnél kialakult potenciálvölgy következtében. Ugyanakkor a határfelület mentén az elektronok mozgása szabadnak tekinthető. GaAs/AlGaAs *heteroszerkezetben* az elektronok effektív tömege $0.067m_e$ (a szabadelektron-közelítés nagyon jól használható). A heteroszerkezet határán egy *két-dimenziós elektrongáz* alakul ki. Fémekben a Fermi-energia tipikusan eV nagyságrendű és ennek megfelelően a Fermi-hullámhossz (a de-Broglie hullámhossz) 1 \AA nagyságrendű. GaAs/AlGaAs heteroszerkezetben a Fermi-energia jóval kisebb, 14 meV, és így a Fermi-hullámhossz elég nagy, kb. 400 \AA , azaz sok esetben összemérhető a minta méretével. Hasonlóan — az elektronok mozgását meghatározó másik fontos paraméter — a szabad úthossz is nagyon nagy GaAs/AlGaAs-ben, tipikusan 100 – 1000 nm között van. Negatívan töltött kapuelektrodákat helyezve a heteroszerkezet tetejére, az elektronok mozgását tovább korlátozhatjuk. Így elérhető, hogy az elektronokat egy szűk csatornába vagy egy zárt részbe tereljük. Az elektronok szabadon, ütközések nélkül mozoghatnak a mintában, más szóval *ballisztikus* módon. Továbbá, a transzport *fáziskoherens*, azaz kvantummechanikailag a rendszert leíró hullámfüggvény fázisa egy a minta méretével összemérhető távolságon, a *fáziskoherencia-hosszon* (ez elérheti a 100 \mu m -t is) belül nem ugrik. A kvantumos interferenciák határozzák meg a rendszer vezetőképességét. Az elektronok transzportját jellemző ellenállás nem az ohmikus diszipáció, hanem az elektronrendszert határoló tartomány határán történő szóródás következménye. Az elektron-fonon és az elektron-elektron kölcsönhatás (mindkettő erősen hőmérséklet-függő) miatt a fáziskoherencia-hossz, és így a kvantumos effektusok szerepe csökken. Ezért a kísérleteket néhány K alatti hőmérsékleten végzik. Azóta számos új jelenséget sikerült felfedezni, megérteni. Ilyenek például az univerzális vezetőképesség fluktuáció, a gyenge lokalizáció, a kvantum Hall-effektus, a Coulomb-blokád. Élénken kutatott rendszerek például a kvantum drótok és pontkontaktusok, a kvantumpöttyök, az egyelektronos tranzistorok, a mezoszkopikus szuperrácsok, az alacsonydimenziós kaotikus biliárdok. A mezoszkopikus rendszerek fizikájáról több kitűnő mű született [1–10].

Mára ezen a téren a kutatás fő irányvonala a még komplexebb rendszerek, az ún. *hibrid* nanoszerkezetek felé, illetve a *spintronikai eszközök*, és az elmúlt négy évben a *grafén*

felé fordult. A hibrid nanoszerkezetek kutatási területe a mezoszkopikus rendszerek korábbi vizsgálatából fejlődött ki. A hibrid nanoszerkezetek egyik példája, amikor egy mezoszkopikus normál vezető mintát (N) szupravezetővel (S) hozunk kontaktusba. Az ilyen hibrid normál-szupravezető (N-S) szerkezetek is fáziskohereusak tekinthetők. A mezoszkopikus rendszereknek és a szupravezetésnek, mint két egymástól távoli területnek a találkozása tapasztalható.

Bizonyos félvezetőkben a spin-pálya kölcsönhatás nem hanyagolható el. A félvezető nanoszerkezetek spinfüggő jelenségeinek vizsgálata az utóbbi idők kiemelkedő kutatási területévé vált. Ezt a kutatási területet gyakran *spintronikának* nevezik az irodalomban. Nemrégiben *Datta-Das* olyan térvezérlésű tranzisztort javasolt, melyben a spin-pálya kölcsönhatás erőssége egy kapufeszültséggel egyszerűen hangolható, és így az elektronok töltésén kívül a spinjük is kontrollálható. Ezeket a tranzisztorokat gyakran *Datta-Das spintranzisztornak* is nevezik.

2004-ben grafitból sikerült egy, illetve néhány atomi réteget leválasztani és transzport-méréseket végezni rajtuk. A grafit egy rétegét *grafénnek* nevezik az irodalomban. A grafén iránti nagy érdeklődést az váltotta ki, hogy graféneken végzett mérések szerint a kvantum Hall-effektus alapvetően eltér a hagyományos, kétdimenziós elektrongázban megfigyelt effektushoz képest, és ráadásul még szobahőmérsékleten is megfigyelhető. Kiderült, hogy grafénben az elektronok dinamikája egy zérus tömegű, kétdimenziós *Dirac-egyenlettel* írható le, és ezért gyakran ezeket az elektronokat *Dirac-fermionoknak* is nevezik. Napjainkra ezek a kezdeti kísérleti és elméleti eredmények óriási érdeklődést váltottak ki, és a kvantum Hall-effektus mellett számos, csak a kvantum-elektrodinamikában ismert jelenséget jósoltak meg, mint például a *Klein-paradoxont* vagy a *Zitterbewegungot*. De a Dirac-egyenlettel jól leírható elektronok transzportja is jelentősen eltér a megszokott kétdimenziós elektrongáz transzportjától. A normál-szupravezető szerkezetek, a spintronikai rendszerek és a grafén fizikája sok hasonlóságot mutat, mivel mindkettőnél az elektronok dinamikáját leíró Hamilton-operátor egy 2×2 -es mátrix.

Ebben a dolgozatban a fenti három kvantumoz rendszert fogjuk alaposabban tanulmányozni. E rövid bevezető után három nagy fejezetben ismertetem a hibrid normál-szupravezető szerkezetekkel, a spintronikai rendszerekkel, illetve a grafénnel kapcsolatos kutatási eredményeim egy részét. Mivel mára már mind a három terület komoly kutatási területté vált, fontosnak tartottam ezeknek egy részletesebb áttekintését. A dolgozat megírásánál, különösen a bevezető részek kidolgozásánál fontos célomnak tekintettem azt is, hogy azokat felhasználhassam az egyetemi oktatásban is. Ennek megfelelően, törekedtem egy bőséges irodalmi jegyzék összeállítására, ami remélhetőleg hasznos lehet a fenti témák iránt érdeklődő kutatók számára is. Az egyes fejezetek bevezető szakaszai után, az elmúlt tíz éves munkámból válogatva néhány fontosabb eredményt ismertetek. Az egyes kutatási területek látszólag elkülönülő részei a fizikának. A válogatással az volt a célom, hogy rávilágítsak a fenti három fizikai rendszer közti finom kapcsolatokra.

1. fejezet

Normál-szupravezető hibrid rendszerek

1.1. Andreev-reflexió

A normál struktúrákat szupravezető elemekkel kiegészítve, az *Andreev-reflexió* gazdagíthatja a jelenségek kört, és alapvető módon befolyásolja a rendszer transzport-tulajdonságait, ill. az energiaszintjeit. Az ilyen hibrid rendszerekben az Andreev-reflexió során a normál fém (N) és a szupravezető (S) határán az elektron, melynek energiája a Fermi-energiához képest kisebb a szupravezető gapjénél, lyukként reflektálódik vissza és a bejövő elektron irányával ellentétes irányba halad. Ez a tisztán kvantummechanikai jelenség ellentétes az ún. normál-reflexióval, amikor az elektron szemiklasszikusan úgy pattan vissza a határfelületről, mint egy biliárdgolyó a biliárd faláról. Az elmúlt 10 évben történt jelentős technológiai fejlődés révén, ma már kísérleti módszerekkel jól tanulmányozható a jelenség, és számos új jelenséget is felfedeztek.

Tekintettel arra, hogy a dolgozatban vizsgált hibrid rendszerekben az Andreev-reflexió alapvetően meghatározó folyamat, most megvizsgáljuk közelebbről a jelenséget. Ha egy normál fémhez szupravezetőt csatolunk, a Fermi-energiáknak a két tartományban azonosnak kell lennie. Az S oldalon az elektronok alapállapotban kötött párokban, ún. *Cooper-párokb*an vannak jelen. Így az N oldalon *két* elektronnak és az S oldalon egy Cooper-párnak a kémiai potenciálja lesz azonos. Legyen a kötött Cooper-pár energiájának a fele Δ , azaz a kötési energia egy elektronra vonatkoztatva. A Δ mennyiséget gyakran *párpotenciálnak* is nevezik az irodalomban. Tegyük fel, hogy az N oldalról egy elektron érkezik az N-S határfelületre, melynek energiája kisebb a Δ energiánál. Az elektronnak nincs partnere, mellyel Cooper-párt alkothatna az S oldalon, hiszen energiája kisebb a Cooper-pár létrejöttéhez. Az elektronnak vissza kell reflektálódni a határról. Ez a reflexió meglehetősen különös módon megy végbe. A jobb megértés érdekében célszerű kvázirészecske képben gondolkodni. Tegyük fel, hogy az N-S határfelületen Δ értéke zérustól (az N oldalnak megfelelően) változik az egyensúlyi értékhez a bulk szupravezetőben egy $\xi_c \sim \hbar v_F / \Delta$ koherenciahossz méretű távolságon belül. A kvázirészecske spektruma a szupravezetőben

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - E_F\right)^2 + \Delta^2}$$

és a kvázirészecskék csoportsebességét a

$$\mathbf{v}_{cs} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$$

kifejezés adja. Az N oldalon $\Delta = 0$ és a diszperziós reláció a $k_F = \sqrt{2mE_F}/\hbar$ Fermi-hullámszám környezetében $E(\mathbf{k}) = \left| \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - E_F \right|$ alakú. Ha $k < k_F$, akkor a kvázirészecske csoportsebessége negatív lesz (\mathbf{k} -val ellentétes irányú). Ezeket a kvázirészecskéket lyukszerű állapotoknak nevezik. Az $E(\mathbf{k})$ diszperziós görbén ezekre az állapotokra a meredekség negatív. Az $E(\mathbf{k})$ diszperzióknak ezt a részét lyukszerű ágaknak nevezik. Az elektronszerű ágon a kvázirészecske sebessége pozitív, az állapot elektronszerű. Az N-S határra érkező Δ -nál kisebb energiájú \mathbf{k} állapotú elektronszerű kvázirészecske visszareflektálódik az N-S határfelületről. Ilyen reflexió során az energia megmarad. Megbecsülhetjük a $\delta p = \hbar \delta k$ kváziimpulzus változást a reflexió során. A δp változás nagyságrendileg egyenlő a dp/dt és annak a δt időnek a szorzatával, ami alatt a részecske a határfelületi tartományon áthalad, azaz $\delta t \sim \xi/v_F$. Ugyanakkor dp/dt egyenlő a részecskére ható erővel, azaz $-dV/dx \sim \Delta/\xi$ értékkel. Így

$$\delta k \sim \frac{1}{\hbar} \frac{\xi}{v_F} \frac{\Delta}{\xi} = \frac{\Delta}{\hbar v_F} = k_F \frac{\Delta}{2E_F} \ll k_F.$$

Az utóbbi egyenlőtlenség abból következik, hogy szupravezetőkben $\Delta/E_F \ll 1$, tipikusan kisebb 0.01-nál. Ez azt jelenti, hogy a kvázirészecske impulzusának változása sokkal kisebb magánál a kváziimpulzusnál. De a reflexió után az elektronnak visszafelé kell haladnia. Ezt a két feltételt csak egy módon lehet teljesíteni, nevezetesen ha a „részecske” átalakul „antirészecskévé”, az N oldalról bejövő elektronszerű kvázirészecske átmegy lyukszerű állapotba, gerjesztésbe. Az energia és a kváziimpulzus megmarad. Azonban a kvázirészecske \mathbf{v}_{ref} sebessége a bejövő kvázirészecske \mathbf{v}_{inc} sebességével ellentétes irányú lesz a reflexió után:

$$\mathbf{v}_{\text{ref}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = - \frac{|\mathbf{v}_{\text{inc}}| \mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} = -\mathbf{v}_{\text{inc}}. \quad (1.1)$$

Az energia és a kváziimpulzus megmarad, de a sebesség előjelet vált. Az ilyen reflexió alapvetően eltér a normál reflexiótól, ahol csak a sebesség normál komponense vált előjelet. Ezt a speciális reflexiót *Andreev-reflexiónak* nevezik [11].

Kérdés vajon megmarad-e a töltés? Természetesen, igen. A normál oldalról érkező $E_F + E$ energiájú és \mathbf{k} állapotú elektron „felszed” egy másik $-\mathbf{k}$ állapotú (ellentétes impulzusú) és $E_F - E$ energiájú elektront és így Cooper-párt alkotva bemennek a szupravezetőbe. Visszamarad egy „antirészecske”, melynek impulzusa ellentétes a felszedett elektron impulzusával, azaz azonos irányú az eredetileg bejövő elektron impulzusával.

A fordított folyamat is megvalósulhat. Ha egy lyukszerű kvázirészecske érkezik az N-S határfelületre, akkor egy elektronszerű kvázirészecske reflektálódik vissza a bejövő részecske sebességével ellentétes irányban. A gondosabb kvantummechanikai számolások szerint az Andreev-reflexió során a hullámfüggvényben egy additív ϕ_A fázis lép fel¹. A fázisugrás mind az elektronból lyukszerű részecskébe való reflexió, mind a fordított

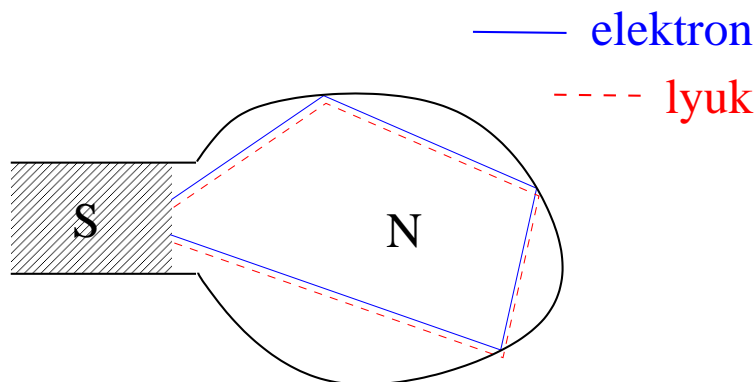
¹Ez az eredmény a később ismertett (1.3) a Bogoliubov–de Gennes-egyenletből vezethető le.

folyamat esetén:

$$\phi_A = -\arccos \frac{E}{\Delta}, \quad (1.2)$$

ahol E a kvázirészecske energiája a Fermi-energiához viszonyítva. A későbbiekben látni fogjuk, hogy ez a fázisugrás alapvetően fontos a hibrid rendszerek energiaspektrumának meghatározásánál. Andreev eredeti munkáját követően több könyv ismerteti a jelenséget [12–14], és számos összefoglaló mű is készült a legújabb kutatási eredményekről [6, 15–17].

Az Andreev-reflexió miatt kialakuló klasszikusan periódikus pályák a Bohr-Sommerfeld kvantálás alapján diszkrét energiaspektrumot eredményeznek. Vékony fémlappal érintkező szupravezető rendszer energiaszintjeit elsőként *de Gennes* és *Saint-James* tanulmányozták a ma már híressé vált rövid cikkükben [18]. Ha a szupravezető egy ballisztikus normál fémmel érintkezik, a rendszerben az elektronok szóródás nélkül mozoghatnak a normál tartományban, a rendszert *Andreev-biliárdnak* nevezik (lásd az 1.1 ábrát). Ilyen rendszereket intenzíven tanulmányozták az elmúlt években [19–27].



1.1. ábra. Tetszőleges alakú normál (N) tartományban minden elektron és az Andreev-reflexió után visszafelé haladó lyuk együttesen periódikus pályát alkotnak.

A kötött állapotokat vizsgálták S-N-S rendszerekben is [28–31]. Vizsgálták az erős mágneses térben lévő félvégtelen N tartomány és vele kontaktusban lévő félvégtelen szupravezető rendszer együttesét is [32].

Az Andreev-reflexiónak egy érdekes következménye például az, hogy ha egy klasszikusan kaotikus biliárdot (kétdimenziós elektrongáz kaotikus tartományba zárva) szupravezetővel veszünk körbe, akkor a rendszer integrálhatóvá válik klasszikus szempontból. Minden trajektória periódikus lesz egy „húr” mentén. A részecske helyét egyértelműen meghatározhatjuk a kezdőfeltételek alapján. Ha az N tartomány csak egy részénél érintkezik a szupravezetővel (lásd az 1.1 ábrát), akkor csak azok a pályák válnak periódikussá, melyek elérik az N-S határfelületet. A későbbiekben ezeket a rendszereket részletesebben is vizsgáljuk.

Az elmúlt két évtizedben a *biliárdoknak* nevezett normál ballisztikus rendszerekben a *kvantumkáosz* jelenséget élénken kutatták [33–35]. A 80-as évek egyik alapvető kutatási kérdése volt, hogy egy biliárd klasszikusan kaotikus jellege hogyan tükröződik a kvantummechanikailag számolt energiaszintek statisztikájában. Ezen terület kutatási eredményeit, problémáit szeretnénk kiterjeszteni hibrid N-S rendszerekre. Az irodalmi adatok szerint az N-S rendszerek ilyen szempontból történő vizsgálata még nem történt meg. Így ezeknek a rendszereknek a vizsgálata újabb kutatási területnek bizonyulhat

a jövőben. A bemutatott eredmények ennek a programnak a kezdeti lépései. A dolgozat célja a numerikusan egzakt kvantummechanikai és szemiklasszikus számolások összehasonlítása különböző N-S rendszerekre.

Az N-S rendszer energiaszintjeit az ún. Bogoliubov–de Gennes-egyenlettel [36] lehet meghatározni, mely a megfelelő Schrödinger-egyenlet szupravezető rendszerek esetén. Lényegében ez az egyenlet az inhomogén szupravezetők leírására szolgál. Az utóbbi kutatásaink szerint bizonyos N-S rendszerek állapotsűrűségében a normál tartomány alakjától függően szingularitások jelennek meg, vagy kialakulhat egy minigap. Felmerül a kérdés, hogy milyen feltételek mellett lesz szinguláris az állapotsűrűség. Hogyan függ a szingularitások helye a biliárd geometriájától? Milyen alakú biliárdok esetén alakulhat ki minigap? Hogyan függ az N-S rendszer energispektruma a mágneses tértől? A feltett kérdésekre csak egy átfogó, sokféle N-S rendszerre kiterjedő vizsgálattal lehet válaszolni. E fejezet következő szakaszaiban ezekre a kérdésekre igyekszünk válaszolni.

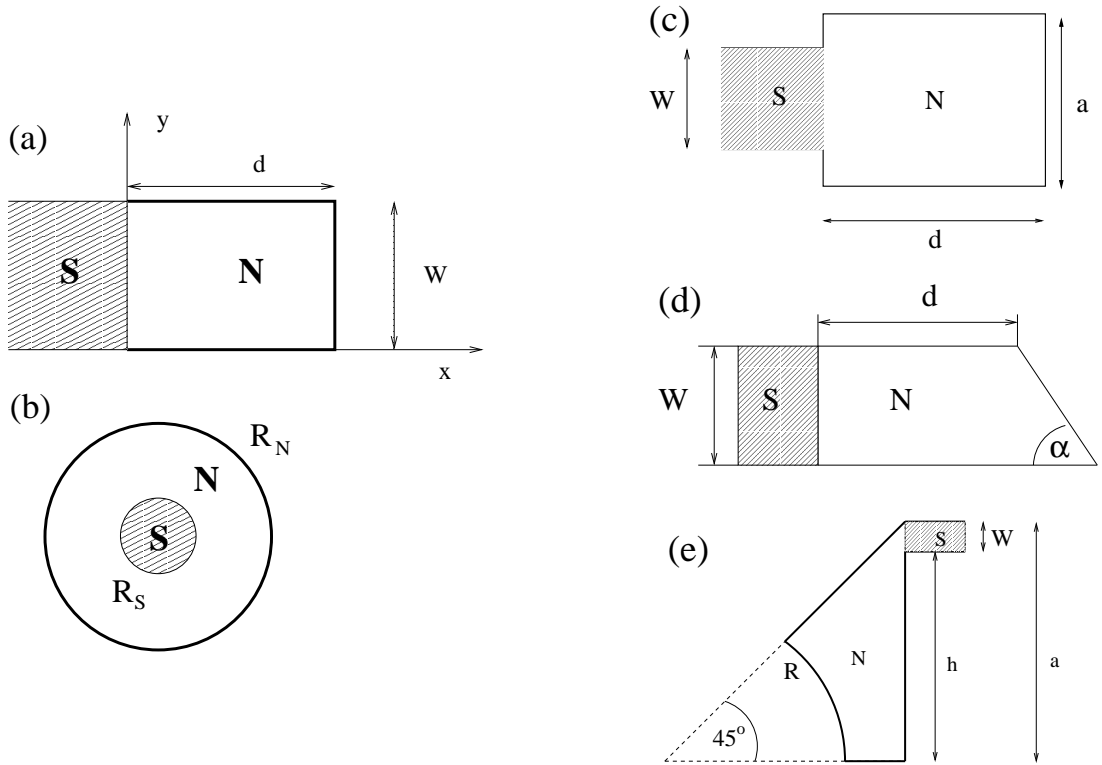
1.2. Kvantummechanikai leírás

A fejezet további részében a [A1–A4] cikkeinkben közölt eredményeinket foglaljuk össze.

Ebben a részben az 1.2 ábrán látható N-S rendszereket vizsgáljuk kvantummechanikailag. A rendszerre érvényes Bogoliubov–de Gennes-egyenlet a következő alakú:

$$\begin{pmatrix} H_0 & \Delta \\ \Delta^* & -H_0^* \end{pmatrix} \Psi = E \Psi, \quad (1.3)$$

ahol Ψ a két-komponensű hullámfüggvény, és $H_0 = (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2/(2m_{\text{eff}}) + V - E_F$. Az E sajátenergiát a Fermi-energiához viszonyítva mérjük, melyek értéke az S és N tartományban $E_F = E_F^{(S)}, E_F^{(N)}$. Hasonlóan az effektív tömeg az S és N tartományban $m_{\text{eff}} = m_S, m_N$. A $*$ a komplex konjugálást jelenti. A $\Delta(\mathbf{r})$ párpotenciál általában lehet komplex mennyiség is. Ha a mágneses tér nem zérus, akkor a komplex konjugálás annak felel meg, hogy a mágneses teret ellentétes irányúnak vesszük H_0 -ban. Ebben a fejezetben a mágneses teret zérusnak vesszük (azaz $\mathbf{A} = 0$). Későbbiekben (lásd az 1.5. fejezetet) vizsgáljuk az 1.2 b ábrán látható esetet a síkra merőleges külső mágneses tér jelenlétében is.



1.2. ábra. A normál (N) részhez csatolódik a szupravezető (S) tartomány. Az (a) és (b) ábrákon szeparálható box és diszk elrendezés, a (c) ábrán integrálható, a (d) ábrán ún. pszeudo-integrálható, míg az (e) ábrán kaotikus N-S rendszer látható.

A szupravezető helyfüggő $\Delta(\mathbf{r})$ párpotenciálját a szokásos lépcsőfüggvénnyel közelítjük, azaz értéke zérus az N részben és konstans Δ_0 az S tartományban. A közelítés jól alkalmazható, ha $\xi_0 = \hbar v_F / \Delta_0$ koherenciahossz sokkal kisebb az N tartomány méreténél, ahol v_F a Fermi-sebesség. Ebben az esetben megmutatható, hogy

nincs szükség az önkonzisztens számolásra [37, 38]. A Blonder, Tinkham és Klapwijk [39] által először használt modell alkalmazható (az irodalomban gyakran BTK modellként hivatkoznak rá). Dirichlet határfeltételt (végtelen potenciálfalat) tételezzük fel az N tartomány határán (kivéve az N-S részt). Továbbá az N-S határon, például oxidréteg miatt, jelenlévő potenciálgátat Dirac-delta potenciállal vesszük figyelembe, azaz $V(\mathbf{r}) = U_0 \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{NS}) d^2\mathbf{r}_{NS}$, ahol \mathbf{r}_{NS} a határfelület helyvektora. Az N-S rendszer E energiaszintjei a Bogoliubov–de Gennes-egyenlet pozitív sajátértékei. Ebben a dolgozatban csak a szupravezető gap alatti spektrumot vizsgáljuk: $0 < E < \Delta_0$. A gap fölötti energiák esetén, az Andreev-reflexió valószínűsége jóval kisebb a gap alatti energiákhoz viszonyítva.

A Ψ hullámfüggvényt a két tartományban egy alkalmas bázisban fejtjük ki. A megfelelő lineárkombinációs-együtthatókat az N-S határon érvényes határfeltételből számolhatjuk ki [40]:

$$\Psi^{(N)}(\mathbf{r}) \Big|_{\text{hat}} = \Psi^{(S)}(\mathbf{r}) \Big|_{\text{hat}}, \quad (1.4a)$$

$$\mathbf{n} \cdot \text{grad} \left[\Psi^{(N)}(\mathbf{r}) - \frac{m_N}{m_S} \Psi^{(S)}(\mathbf{r}) \right] \Big|_{\text{hat}} = \frac{2m_N}{\hbar^2} U_0 \Psi^{(S)}(\mathbf{r}) \Big|_{\text{hat}}, \quad (1.4b)$$

ahol $\Psi^{(N)}$ és $\Psi^{(S)}$ az N-S tartományban a hullámfüggvény és \mathbf{n} a határfelületre merőleges egységvektor. Érdeemes megjegyezni, hogy az (1.4)-nek a második egyenletben a hullámfüggvények deriváltjai (pontosabban a határfelületre merőleges irányú gradiensek) az N-S határon lévő Dirac-delta potenciálgát miatt nem azonosak. Az egyenlet az egykomponensű Schrödinger-egyenlet esetében, a jól ismert feltétel általánosításának tekinthető.

A továbbiakban az 1.2 ábrán látható N-S rendszereket külön-külön vizsgáljuk. A box és diszk geometriák esetében (az 1.2 a és b ábrák) a Ψ hullámfüggvény szeparálható, és végül egy ún. egydimenziós Bogoliubov–de Gennes-egyenletet kapunk. Így a számolások jelentősen egyszerűsíthetők. Ugyanakkor az 1.2 c-e ábráknak megfelelő N-S rendszereknél nem szeparálható a hullámfüggvény. Ekkor a szekuláris egyenlet jóval bonyolultabb, mint az később látható.

1.2.1. Szeparálható rendszerek

Az (1.4) határfeltételek kielégítése egy szekuláris egyenletre vezet. A számolások részletei megtalálhatók az [A1] cikkünkben. Box geometria esetén a szekuláris egyenlet:

$$\text{Im} \left\{ \gamma_e \left(Z - i \frac{m_N}{m_S} q_m^{(e)} + k_m^{(e)} \cot k_m^{(e)} d \right) \left(Z + i \frac{m_N}{m_S} q_m^{(h)} + k_m^{(h)} \cot k_m^{(h)} d \right) \right\} = 0, \quad (1.5)$$

ahol $k_m^{(e)}(E)$, $k_m^{(h)}(E)$ és $q_m^{(e)}(E)$, $q_m^{(h)}(E)$ az elektron/lyuk hullámszámvektorok az N és az S tartományban (lásd [A1]). $Z = (2m_N/\hbar^2) U_0$ a normalizált potenciálgát és γ_e egy komplex fázisfaktor, az (1.2) egyenletben felírt ϕ_A fázisugrással kapcsolatos:

$$\gamma_e = e^{-i\phi_A} = \frac{E + i\sqrt{\Delta_0^2 - E^2}}{\Delta_0}. \quad (1.6)$$

Az $\text{Im}\{\cdot\}$ az imaginárius részt jelöli.

Hasonlóan kiszámítható a szekuláris egyenlet diszk esetén (a részletek [A1] cikkünkben található):

$$\text{Im}\{\gamma_e D_m^{(e)}(E) D_m^{(h)}(E)\} = 0, \quad (1.7a)$$

ahol $D_m^{(h)}(E) = [D_m^{(e)}(-E)]^*$ és

$$D_m^{(e)}(E) = \begin{vmatrix} J_m(k_e R_S) - \frac{J_m(k_e R_N)}{Y_m(k_e R_N)} Y_m(k_e R_S) & J_m(q_e R_S) \\ k_e \left[J'_m(k_e R_S) - \frac{J'_m(k_e R_N)}{Y'_m(k_e R_N)} Y'_m(k_e R_S) \right] & Z J_m(q_e R_S) + \frac{m_N}{m_S} q_e J'_m(q_e R_S) \end{vmatrix}. \quad (1.7b)$$

A fenti determinánsban $J_m(x)$ és $Y_m(x)$ a Bessel és Neumann függvények, és a vessző az argumentum szerinti deriváltat jelöli.

1.2.2. Nem szeparálható rendszerek

A Ψ hullámfüggvény nem szeparálható. A szekuláris egyenlet a következő alakban adható meg (lásd [A2–A4] cikkeinket):

$$\det\left(\text{Im}\{\gamma_e D_e(E) D_h(E)\}\right) = 0, \quad (1.8a)$$

ahol az egyes $\tilde{M} \times \tilde{M}$ méretű mátrixok:

$$D_e(E) = Q(E) + K(E)G(E), \quad (1.8b)$$

$$D_h(E) = [Q(-E) - K(-E)G^*(-E)]^{-1}, \quad (1.8c)$$

$$G(E) = [1 - S_0(E)][1 + S_0(E)]^{-1}. \quad (1.8d)$$

Itt \tilde{M} az $M = k_F W / \pi$ egész része, azaz $\tilde{M} = [M] = [k_F W / \pi]$ a nyitott csatornák száma a szupravezető tartományban, Q and K diagonális mátrixok, melyek mátrix-elemei $Q_{nm}(E) = \delta_{nm} q_n(E)$ és $K_{nm}(E) = \delta_{nm} k_n(E)$, ahol $k_n(E) = k_F \sqrt{1 + \frac{E}{E_F} - \frac{n^2}{M^2}}$

és $q_n(E) = k_F \sqrt{1 + i \frac{\sqrt{\Delta_0^2 - E^2}}{E_F} - \frac{n^2}{M^2}}$ az elektronok tranzverzális hullámszámvektorai

az N és S tartományokban. Végül $S_0(E)$ a normál rendszer $\tilde{M} \times \tilde{M}$ méretű szórás-mátrixa a szupravezető nélkül. Az $S_0(E)$ szórás-mátrix csak a normál rendszertől, annak geometriájától függ, és számítása is a normál rendszerekre ismert módszerekkel lehetséges. A számolás során feltettük, hogy a Fermi-energiák és az effektív tömegek azonosak az N és S részben.

A numerikus eredményeket az 1.4 fejezetben mutatjuk be. A következő részben ismertetjük a szemiklasszikus leírást, mely lehetőséget nyújt a kvantumos eredmények értelmezésére.

1.3. Szemiklasszikus leírás

A kísérletileg egyik legfontosabb mennyiség az energiaszintek állapotsűrűsége. Ha egy zárt rendszerhez kontaktusokat kapcsolunk, a kapott rendszer vezetőképessége az alagúthatás következtében arányos az állapotsűrűséggel. Így az állapotsűrűség alapvető fizikai mennyiség a transzport-tulajdonságok szempontjából.

Adott E energia alatt lévő állapotok száma $N(E) = \sum_n \Theta(E - E_n)$, ahol $\Theta(x)$ a Heaviside-függvény. $N(E)$ -t gyakran lépcsőfüggvénynek nevezik, és általában egy fluktuáló mennyiség. A fluktuáció egy $\tilde{N}(E)$ „sima” függvény körül történik. Az állapotsűrűség $N(E)$ deriváltja: $\varrho(E) = dN(E)/dE$. Közismert, hogy kétdimenziós szabad elektrongáz állapotsűrűsége konstans. A sima $\tilde{N}(E)$ rész a statisztikus fizikából ismert Weyl-formula [41] (további részletek találhatók [42–48] művekben) alapján határozható meg szemiklasszikus közelítésben:

$$\tilde{N}(E) = \frac{1}{h^2} \int_{H_{\text{cl}}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \leq E} d^2p d^2r \Theta(E - H_{\text{cl}}(\mathbf{p}, \mathbf{r})), \quad (1.9)$$

ahol $H_{\text{cl}}(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ a klasszikus Hamilton-függvény. Az N-S rendszerekben az Andreev-állapotok energiaszintjeire $E < \Delta_0$, így nem lehet definiálni a klasszikus Hamilton-függvényt. Más eljárás szükséges. A továbbiakban ezt ismertetjük.

Ha az elektron az N-S határról indulva és az N tartományban a falakon való többszörös pattanás után visszatér az N-S határfelületre, akkor az Andreev-reflexió következtében egy lyuk verődik vissza, mely ellentétes irányban visszafelé ugyanazt az utat járja be, mint az elektron. Ezután a folyamat ismétlődik. A fenti folyamat egy teljes periódus. Látható, hogy bármilyen pályán is halad kezdetben az elektron a folyamat mindig periódikus. Minden pálya egy-egy periódikus pályának felel meg. A Bohr-Sommerfeld kvantálás szerint a periódikus pályákhoz egy-egy kvantált energiaszint feleltethető meg. Az $(E_F + E)$ energiájú elektron hullámfüggvényének a fázisa s út megtétele után $(E_F + E)s/(\hbar v_F)$ értékkel változik meg, míg az $(E_F - E)$ energiájú lyuk esetén a változás $-(E_F - E)s/(\hbar v_F)$ (a negatív előjel amiatt van, hogy a lyuk impulzusa és elmozdulása ellentétes irányú). Korábban láttuk, hogy az Andreev-reflexió során fellép egy ϕ_A fázisugrás is (lásd az 1.2-t). Ezért egy periódikus pálya során a két Andreev-reflexió miatt $2\phi_A = -2\arccos(E/\Delta_0)$ további fázisváltozás adódik a hullámfüggvény fázisához. A teljes fázis megváltozása kvantált energiszint esetén 2π egész számú többszöröse, azaz $(E_F + E)s/(\hbar v_F) - (E_F - E)s/(\hbar v_F) - 2\arccos(E/\Delta_0) = 2\pi n$, ahol n egész szám. Innen az állapotsűrűség meghatározható és a következő eredményt kaptuk:

$$\varrho(E) = M \int_0^\infty ds P(s) \left[\frac{s}{\hbar v_F} + \frac{1}{\sqrt{\Delta_0^2 - E^2}} \right] \sum_{n=0}^\infty \delta \left(\frac{sE}{\hbar v_F} - \left(n\pi + \arccos \frac{E}{\Delta_0} \right) \right), \quad (1.10)$$

$P(s)$ annak a valószínűsége, hogy a részecske az N-S határfelületről indulva, s út megtétele után visszatér az N-S határfelület valamely pontjára, és M a nyitott csatornák száma az S tartományban. Az egyszerűség kedvéért $P(s)$ -t visszatérési valószínűségnek nevezzük.

Az $N(E)$ lépcsőfüggvény az állapotsűrűség integrálásával kapható meg, azaz

$N(E) = \int_0^E \varrho(E') dE'$. Felhasználva az (1.10) egyenletet a következőt kapjuk:

$$N(E) = M \sum_{n=0}^{\infty} \{1 - F[s_n(E)]\}, \text{ ahol} \quad (1.11a)$$

$$s_n(E) = \frac{\left(n\pi + \arccos \frac{E}{\Delta_0}\right)}{E/\Delta_0} \xi_0, \quad (1.11b)$$

$$F(s) = \int_0^s P(s') ds', \quad (1.11c)$$

és ξ_0 a koherenciahossz a szupravezetőben (lásd az 1.2 szakaszt). $F(s)$ az integrális eloszlásfüggvénye a $P(s)$ visszatérési valószínűségnek. $P(s)$ -t normálnak tekintjük, azaz $F(\infty) = 1$. Általában nem szabályos alakú normál tartomány esetén $P(s)$ csak numerikusan (pl. Monte Carlo módszerrel) határozható meg. Box és diszk geometriájú N-S rendszerek esetén sikerült analitikus formulát levezetni $P(s)$ -re. Az eredményeket az 1.4.1 szakaszban ismertetjük. Az 1.4.2 - 1.4.4 részekben mutatunk példát a visszatérési valószínűség és az állapotsűrűség számítására bonyolultabb esetekben.

Fontos megjegyezni, hogy az állapotsűrűség szemiklasszikus alakját többen is levezették az $E \rightarrow 0$ határesetben [20–22, 24–26]. Ebben az esetben az Andreev reflexió miatt fellépő fázisugrás $\phi_A \approx -\pi/2$ -vel közelíthető, és ekkor az (1.10) állapotsűrűségben a szögletes zárójelben lévő második tag hiányzik. Az állapotsűrűség és a (1.11a) lépcsőfüggvény levezetésénél figyelembe vettük, hogy a ϕ_A fázisugrás függ az E energiától, és így a szemiklasszikus eredményeink nem csak az $E \rightarrow 0$ határesetben, hanem a bulk Δ_0 gap alatti teljes energiatartományban használhatók. A következő részekben néhány eredményt mutatunk be az 1.2 ábrákon látható N-S rendszerekre. Látni fogjuk, hogy a szemiklasszikus számolás minden esetben jól egyezik a numerikusan egzakt kvantumos eredményekkel. Ez alapvetően annak köszönhető, hogy szemiklasszikus közelítésben figyelembe vettük a fázisugrás energiafüggését.

1.4. Eredmények

1.4.1. Szeparálható rendszerek

Ebben a részben az 1.2 a és b ábrákon látható box és diszk geometriájú N-S rendszerek energiaszintjeit vizsgáljuk. A $P(s)$ visszatérési valószínűség számításához célszerű az (1.5) és az (1.7) szekuláris egyenletekből kiindulni. A részletek megtalálhatók a [A1] cikkben, itt csak az eredményt közöljük:

$$P(s) = \frac{4d^2}{s^3 \sqrt{1 - \left(\frac{2d}{s}\right)^2}} \Theta(s - 2d), \quad (1.12)$$

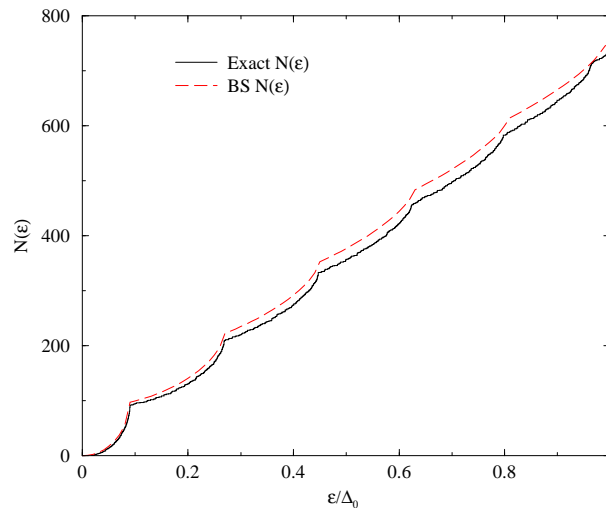
box alakú rendszerre, míg diszk geometriára

$$P(s) = \frac{1}{4 s^2 R_S} \frac{s_{\max}^4 - s^4}{\sqrt{[s_{\max}^4/s_{\min}^2 - s^2][s^2 - s_{\min}^2]}} \Theta(s_{\max} - s) \Theta(s - s_{\min}), \quad (1.13)$$

ahol $s_{\min} = 2(R_N - R_S)$ és $s_{\max} = 2\sqrt{R_N^2 - R_S^2}$. Könnyen kiszámíthatjuk az $F(s)$ integrális eloszlásfüggvényt is:

$$F(s) = \begin{cases} \sqrt{1 - 4d^2/s^2}, & s > 2d, \text{ boxra,} \\ \frac{\sqrt{[s_{\max}^4/s_{\min}^2 - s^2][s^2 - s_{\min}^2]}}{4 s R_S}, & s_{\min} \leq s \leq s_{\max}, \text{ diszkre.} \end{cases} \quad (1.14)$$

Box esetén a kvantummechanikailag egzaktnek tekinthető energiaszinteket az (1.5) egyenlet numerikus megoldásával kaphatjuk. Az $N(E)$ lépcsőfüggvényt az (1.11) egyenletből (1.12) felhasználásával számíthatjuk ki. A kvantumos számolás és a szemiklasszikus közelítéssel kapott lépcsőfüggvények az 1.3 ábrán láthatók.



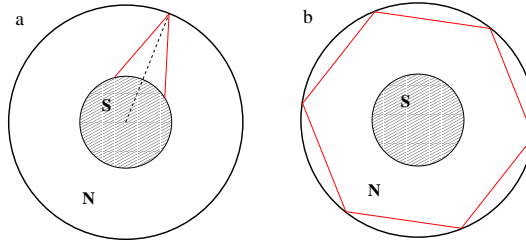
1.3. ábra. Az egzakt kvantummechanikai (folytonos vonal) és a szemiklasszikus (szaggatott vonal) közelítésből kapott $N(E)$ és $\tilde{N}(E)$ lépcsőfüggvények a Δ_0 szupravezető gappal normalizált energia függvényében. A paraméterek: $d/W = 3$, $k_F W/\pi = 87.9$ és $\Delta_0/E_F = 0.02$.

Az ábrából kitűnik, hogy a szemiklasszikus közelítés jól egyezik az egzakt számolással. Jól látható az is az ábrán, hogy a lépcsőfüggvény deriváltja, azaz az állapotsűrűség egyenlő távolságokra szinguláris. A $P(s)$ visszatérési valószínűség (1.12) alakjából világos, hogy az szinguláris $s = 2d$ -nél, és így az (1.10) kifejezéséből következik, hogy a szemiklasszikus közelítésből kapott állapotsűrűség is szinguláris. A szingularitások helyét az $s_n(E) = 2d$ egyenletből számíthatjuk ki, ahol $s_n(E)$ az (1.11b) kifejezésből nyerhető. Kis E -re $\arccos \frac{E}{\Delta_0} \approx \pi/2$, és ekkor a szingularitások helyét az alábbi egyszerű kifejezés adja:

$$E_n^{(\text{sing})} = \frac{(n + 1/2) \pi}{1 + s_{\text{sing}}/\xi_0} \Delta_0, \quad (1.15)$$

olyan n egész számokra, melyekre $E_n^{(\text{sing})} < \Delta_0$. A szingularitások helye nagyon jól egyezik a fenti képletből kapható értékekkel. Fontos megjegyezni, hogy a fenti összefüggés az (1.11) egyenletekből vezethető le, és így általánosan (nem csak box geometriára) is érvényes. Itt említjük meg, hogy a korábban de Gennes és Saint-James által vizsgált véges vastagságú normál „film” és egy félvégtelen S rendszer [18] állapotsűrűségében ők is találtak ilyen szingularitásokat. Ezek helye nagyon jól egyezik az (1.15) egyenletből kapott értékekkel.

Diszk geometria estén megmutattuk, hogy klasszikus szempontból kétfajta állapotot különböztethetünk meg. Az ún. Andreev-állapotok esetén az elektron pályája ütközik a szupravezetővel és Andreev-reflexiót szenved. A másik esetben a pálya nem éri el az N-S határfelületet, ezeket *suttogó pályáknak* (angolul *whispering gallery modes*) nevezzük (1.4 ábra). Az egzakt (1.7) kvantálási feltételből a Bessel-függvények Debye-



1.4. ábra. Az (a) ábrán az Andreev-állapotoknak, míg a (b) ábrán a suttogó állapotoknak megfelelő klasszikus pályák láthatók.

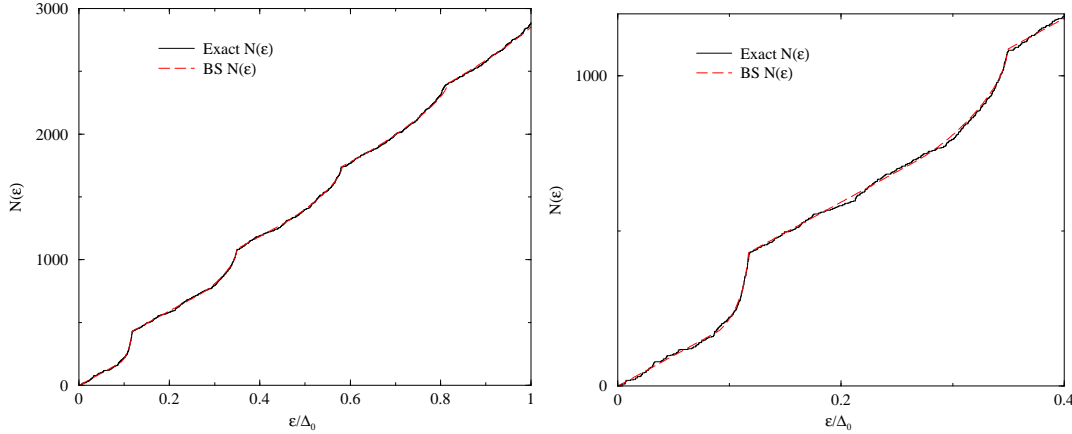
közelítésével [50] megmutattuk, hogy $m > k_F R_S$ esetén a kvantálási feltétel nagyon jó közelítéssel megegyezik azzal a kvantlási feltétellel, melyet abban az esetben kapunk, ha az elektron energiaszintjeit egy R_N sugarú tömör diszkben számolnánk (részleteket illetően lásd [A1]). Ezek az állapotok felelnek meg a suttogó pályáknak szemiklasszikus közelítésben és az állapotsűrűséghez egy konstans járulékot adnak:

$$\rho_{\text{wgs}} = \frac{(k_F R_N)^2}{2E_F} \left[1 - \frac{2}{\pi} \left(\frac{R_S}{R_N} \sqrt{1 - \left(\frac{R_S}{R_N} \right)^2} + \arcsin \frac{R_S}{R_N} \right) \right]. \quad (1.16)$$

Andreev-állapotok esetén szemiklasszikus közelítésben a lépcsőfüggvényt ismét az (1.11) egyenletből (1.13) felhasználásával számíthatjuk ki.

A kvantummechanikailag egzaktan tekinthető energiaszinteket az (1.7) egyenlet numerikus megoldásával kaphatjuk. Az 1.5 ábra a kvantumos számolás és a szemi-

klasszikus közelítéssel kapott lépcsőfüggvényeket mutatja. Az ábrán látható lépcsőfüg-



1.5. ábra. Az egzakt kvantummechanikai (folytonos vonal) és a szemiklasszikus (szaggatott vonal) közelítésből kapott $N(E)$ és $\tilde{N}(E)$ lépcsőfüggvények a Δ_0 szupravezető gappal normalizált energia függvényében. A bal oldali ábra a teljes spektrumot mutatja, míg a jobb oldali ábrán egy kinagyított részlet látható. A paraméterek: $R_S/R_N = 2/7$, $\Delta_0/E_F = 0.05$ és $k_F R_S = 100$. Ekkor $s_{\min}/\xi_0 = 12.5$.

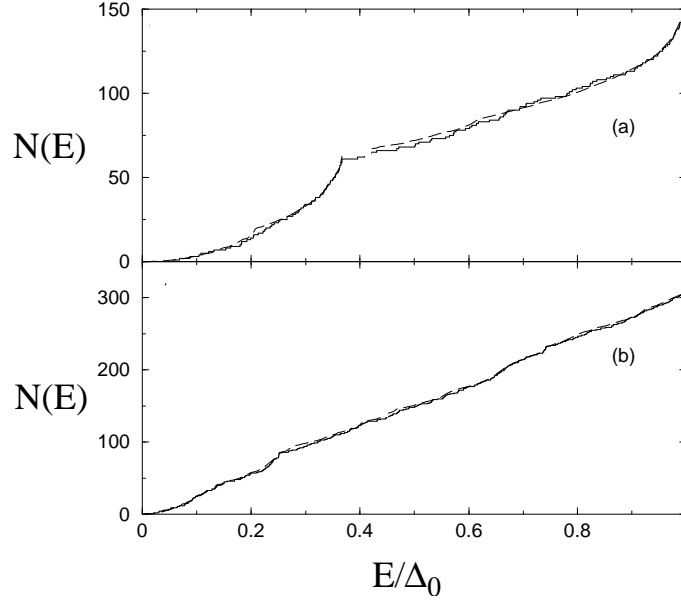
gvény energia szerinti deriváltja, azaz az állapotsűrűség, energiában egyenlő távolságokra szinguláris. Hasonlóan a box geometriához, ennek oka, hogy az (1.13)-ben adott $P(s)$ visszatérési valószínűség szinguláris $s = s_{\min}$ -re. Felhasználva a korábban kapott (1.15) összefüggést a szingularitások helye nagyon jól egyezik az egzakt számolásból kapott értékekkel.

1.4.2. Integrálható rendszerek

Rátérünk az 1.2 c ábrán látható N-S rendszerben a normál tartomány téglalap alakú, azaz klasszikusan integrálható rész. Felmerül a kérdés, hogy a szupravezető hozzácsatolásával hogyan módosul a hibrid rendszer energiaspektruma. Az N-S rendszer hullámfüggvénye nem szeparálható. Az egzakt (kvantumos) energiaszinteket az (1.8) egyenlet numerikus megoldásából, míg a szemiklasszikus lépcsőfüggvényt az (1.11)-ből kaphatjuk.

A kvantumos számolás és a szemiklasszikus közelítéssel kapott lépcsőfüggvények az 1.6 ábrán láthatók. Az ábrákon a szupravezető rész W vastagsága különböző, de mindkét esetben jó az egyezés a kvantumos és a szemiklasszikus számolás között. Ismét megfigyelhető, hogy az állapotsűrűség egyenlő távolságokra szinguláris. Megmutatható, hogy a $P(s)$ visszatérési valószínűség szinguláris $s = 2d$ -re, és hasonlóan a box geometriájú N-S rendszerhez, ebből adódik a szinguláris viselkedés. A $P(s)$ és az $F(s)$ integrális eloszlásfüggvény részletes vizsgálatával kimutattuk, hogy $E \rightarrow 0$ esetén az állapotsűrűség az E -vel arányos tag mellett egy $\ln E$ jellegű logaritmikus tagot is tartalmaz (lásd [A3]). Természetesen a $W \rightarrow a$ határesetben visszkapjuk a box geometriájú N-S rendszerrel kapott eredményeket.

Az irodalomban [20, 21, 26] az állapotsűrűséget illetően több ellentmondásos eredmény jelent meg a fenti geometriájú Andreev-biliárd kapcsán. Vagy nem végeztek el a kvantumos számolást [20, 21], és így a szemiklasszikus jóslat megkérdőjelezhető, vagy a

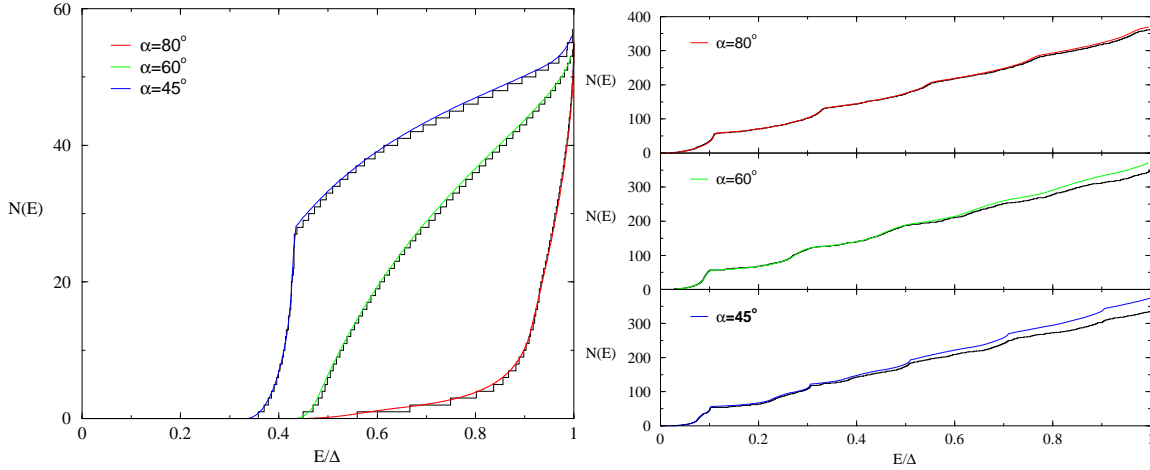


1.6. ábra. Az egzakt kvantummechanikai (folytonos vonal) és a szemiklasszikus (szaggatott vonal) közelítésből kapott $N(E)$ és $\tilde{N}(E)$ lépcsőfüggvények a Δ_0 szupravezető gappel normalizált energia függvényében. A paraméterek: mindkét esetben $d = a$, $M = 55.5$, $\Delta_0/E_F = 0.015$. Az (a) ábrán $W = 0.8a$, míg a (b) ábrán $W = 0.5a$.

Bogoliubov–de Gennes-egyenletnek rácson történő megoldása [26] nem volt elég pontos a szemiklasszikus eredményekkel való egyezéshez. A fent vázolt kutatási eredményeink remélhetőleg segítenek a jobb megértésben.

1.4.3. Pszeudo-integrálható rendszerek

Most az 1.2 d ábrán látható N-S rendszer esetén kapott eredményeket mutatjuk be. A rendszer ún. pszeudo-integrálható. Ilyen rendszerek a sokszögekkel határolt kétdimenziós biliárdok. A Poincaré-metszeten a koatikus tartományok hányada jóval kisebb az integrálható tartományokhoz képest. Ismét az (1.8) egyenlet numerikus megoldásából kaphatjuk az egzakt (kvantumos) energiaszinteket, míg a szemiklasszikus lépcsőfüggvényt az (1.11) alapján. A numerikus eredményeket az 1.7 ábra mutatja. Látható, hogy a szemiklasszikus eredmények ismét nagyon jól egyeznek az egzakt eredményekkel, különösen kis E energiákra. Nagyobb energiákon csak $d \neq 0$ esetben figyelhető meg kisebb eltérés. A $d = 0$ és $d \neq 0$ esetek között a szembevetendő különbség, hogy $d = 0$ -nak megfelelő geometriájú N-S rendszerben a lépcsőfüggvény nem $E = 0$ értéknél kezd változni. Ha a rendszer energiaspektrumában egy, a bulk Δ_0 értékkel összemérhető nagyságú gap lép fel, azt *minigap*nek nevezik. Ilyen minigap figyelhető meg ebben az esetben. Viszont véges d -re ez a minigap eltűnik. Tekintve, hogy a szemiklasszikus közelítés kitűnően egyezik az egzakt számolással, érdemes megvizsgálni a $P(s)$ visszavetési valószínűséget. A részletes vizsgálatokból (lásd [A2]) kiderült, hogy $P(s)$ -nek van egy s_{\max} *felső levágása*, azaz $P(s) = 0$, ha $s > s_{\max}$. Kiszámoltuk s_{\max} -nak az α



1.7. ábra. Az egzakt kvantummechanikai (folytonos vonal) és a szemiklasszikus (szaggatott vonal) közelítésből kapott $N(E)$ és $\tilde{N}(E)$ lépcsőfüggvények a Δ_0 szupravezető gappal normalizált energia függvényében. A bal oldali ábrán $d = 0$, míg a jobb oldali ábrán d -t úgy választottuk meg, hogy a normál tartomány A területe azonos legyen, $A = 5W^2$, minden α értékre. Mindkét esetben az egyéb paraméterek: $M = 55.5$, $\Delta_0/E_F = 0.015$.

szögtől való függését:

$$\frac{s_{\max}}{W} = \begin{cases} -2 \frac{\sin k\alpha \sin[(k+1)\alpha]}{\sin \alpha \cos[(2k+1)\alpha]}, & \text{ha } \frac{\pi/2}{k+1} < \alpha \leq \frac{\pi/2}{k+\frac{2}{3}}, \\ 2 \frac{\sin k\alpha}{\sin \alpha}, & \text{ha } \frac{\pi/2}{k+\frac{2}{3}} < \alpha \leq \frac{\pi/2}{k}, \end{cases} \quad (1.17)$$

ahol $k = 1, 2, 3, \dots$. Felhasználva az (1.11b) egyenletet és elsőrendben sorbafejtve az \arccos tagot az E lehetséges energiszintekre egy E_{gap} alsó korlátot kapunk:

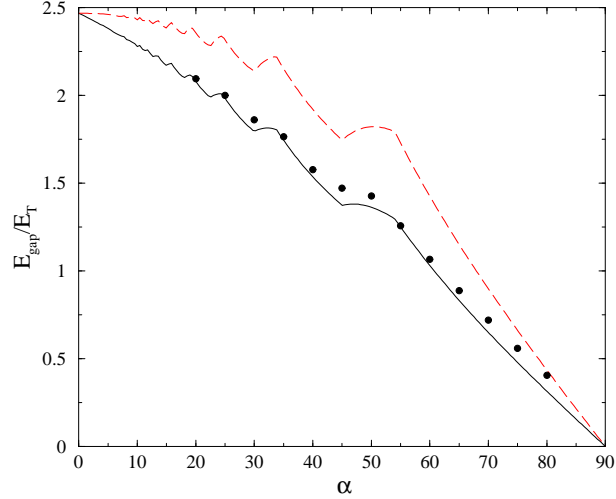
$$\frac{E_{\text{gap}}}{E_T} = \pi^2 \frac{A}{W s_{\max}} \frac{1}{1 + \xi_0/s_{\max}}, \quad (1.18)$$

ahol A az N tartomány területe, $E_T = \frac{M\delta}{4\pi}$ a *Thouless-energia* és $\delta = 2\pi\hbar^2/(mA)$ az átlagos szinttávolság az izolált normál tartományban. A Thouless-energiát a következő módon becsülhetjük meg: ha egy v_F Fermi-sebességgel haladó részecske t_T idő alatt teszi meg a normál tartomány karakterisztikus méretét, akkor a Heisenberg-féle bizonytalansági relációból adódó \hbar/t_T energia tekinthető a Thouless-energiának. A vizsgált N-S rendszerekben $\delta \ll E_T \ll \Delta_0$. A fenti egyszerű képletből kapható minigap nagyon jól egyezik az egzakt számolással, mint az az 1.8 ábrán látható.

Az (1.18) egyenlet tetszőleges alakú N-S rendszerre igaz, melyben a $P(s)$ visszatérési valószínűségnek felső levágása van. Ez a minigap létezésének feltétele.

1.4.4. Kaotikus rendszerek

Az 1.2 e ábrán látható N-S rendszer a jól ismert Sinai biliárd nyolcadrésze, ami klasszikusan kaotikus. Ismét az (1.8) egyenlet numerikus megoldásából kaphatjuk az egzakt (kvantum) energiaszinteket, míg a szemiklasszikus lépcsőfüggvényt az (1.11) alapján. A numerikus eredményeket az 1.9 ábra mutatja.



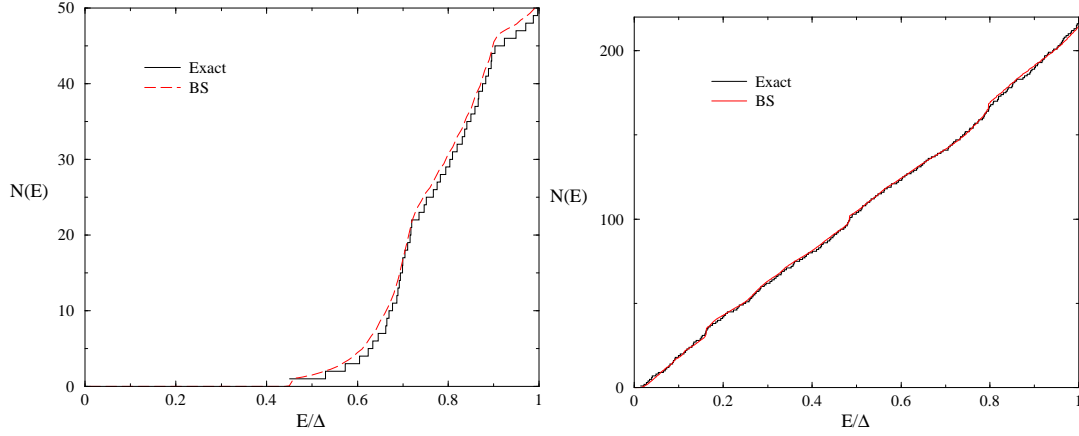
1.8. ábra. A minigap értéke (E_T Thouless-energia egységeiben) az α szög függvényében $d = 0$ esetben. A pontok a minigap egzakt értékeit mutatják, a folytonos vonal az (1.18) egyenletből kapott szemiklasszikus közelítés eredménye (mindkét esetben a nyitott csatornák száma $\tilde{M} = \lfloor \frac{k_F W}{\pi} \rfloor = [55.5]$). A szaggatott vonal a nyitott csatornaszámnak az $\tilde{M} \rightarrow \infty$ határesetében nyert gap értékeit jelöli.

Az ábra bal oldalán lévő eredmény olyan geometriai elrendezésnek felel meg, ahol a szupravezető szélessége megegyezik a normál tartomány függőleges részével, azaz $W = a$. A jobb oldali ábrán a szupravezető rész a függőleges N tartomány felső szélén helyezkedik el, azaz $W = 0.22a$ és $h + W = a$, ahogy ez az 1.2 ábrán látható. Mindkét esetben jó egyezést kaptunk a szemiklasszikus közelítés és az egzakt kvantummechanikai számolás között. A szemiklasszikus számolás során a $P(s)$ visszatérési valószínűséget numerikusan, Monte Carlo módszerrel határoztuk meg. A bal oldali ábrán ismét megfigyelhető egy jelentős nagyságú (a kvantumos számolásból az első energiaszint $0.4503\Delta_0$) minigap, míg a jobb oldalin az első energiaszint sokkal kisebb Δ_0 -nál. A $W = a$ esetben megmutatható, hogy a $P(s)$ visszatérési valószínűségnek mindig van egy s_{\max} felső levágása:

$$s_{\max} = \frac{4a^2}{R + \sqrt{2a^2 - R^2}}. \quad (1.19)$$

Így a minigap értékét ismét az 1.4.3 szakaszban tárgyalt módon az (1.18) egyenlet határozza meg. A paraméterek felhasználásával $E_{\text{gap}} = 0.467\Delta_0$ értéket kapunk, ami nagyon jól egyezik a numerikusan kapott egzakt kvantumos számolással.

Más a helyzet $W < a$ esetben. Az 1.9 ábra jobb oldalán látható egy ilyen elrendezésre az egzakt, illetve a szemiklasszikus közelítésből kapott eredmények. A két számolás közti egyezés szemmel láthatóan nagyon jó. További eredményeinket az [A4] cikkben írtuk le. Kaotikus rendszerekben az első energiaszint (gap) értéke a korábbi elméleti jóslatok szerint [21] a Thouless-energia nagyságrendjébe esik: $E_{\text{gap}} = 0.6E_T$, ahol a Thouless-energiát az (1.18) egyenlet után vezettük be ($E_T = \frac{M\delta}{4\pi}$). Ha a normál rendszer és/vagy a szupravezető méretét kicsit megváltoztatjuk, akkor a gap értéke módosul. Ezt a kísérletekben különböző negatívan töltött kapukkal, elektrodákkal érhetjük el. Korábbi elméleti munkák alapján kiderült, hogy ennek a gapnak az elosz-



1.9. ábra. Az egzakt kvantummechanikai (folytonos vonal) és a szemiklasszikus (szaggatott vonal) közelítésből kapott $N(E)$ és $\tilde{N}(E)$ lépcsőfüggvények a Δ_0 szupravezető gappal normalizált energia függvényében. A paraméterek: $W = a$, $R = 0.8a$, $M = 51.5$ (bal oldali ábra), $W = 0.22a$, $h + W = a$, $R = 0.8a$, $M = 40.51$ (jobb oldali ábra), $\Delta_0/E_F = 0.015$ (mindkét esetben).

lása *univerzális*, ha a gap értékeit megfelelően átskálázzuk [51]. Az 1.2 e ábrán látható geometriai elrendezést használva numerikusan vizsgáltuk a gap eloszlását és jó egyezést kaptunk az elméleti eredményekkel. Mivel ebben a dolgozatban a fő célunk az egzakt és szemiklasszikus eredmények összehasonlítása különböző N-S rendszerekre, most nem térünk ki a további eredmények részletes ismertetésére (lásd [A4]).

1.5. Normál-szupravezető diszk rendszer mágneses térben

Ebben a fejezetben a [A5] cikkünkben közölt eredményeinket foglaljuk össze.

Nemrégiben méréseket végeztek olyan rendszeren, amelyben egy kör alakú szupravezetőt koncentrikusan egy normál tartomány vesz körbe [52]. A rendszert a síkjára merőleges külső mágneses térbe helyezték. A kísérleti eredmények szerint anomális viselkedés (növekedés) figyelhető meg a szuszceptibilitásban a hőmérséklet csökkenésével mK-es hőmérséklet alatt. Számos elméleti javaslat [53–56] ellenére még a mai napig sem sikerült kielégítő magyarázatot adni erre az anomális viselkedésre. A kérdés szisztematikus vizsgálatához ismerni kell a rendszer energiaszintjeit lévén, hogy a szuszceptibilitás egy termodinamikai mennyiség. Ennek érdekében megoldottuk egzaktul a Bogoliubov–de Gennes-egyenleteket erre a rendszerre. Kidolgoztunk egy szemiklasszikus elméletet is, mely nagyon jó egyezést ad az egzakt eredményekkel. A kísérleti paraméter-tartományban numerikusan nincs mód az egzakt számolásra, de a szemiklasszikus számolással jól közelíthetjük az energia-spektrumot. A kutatás jelenlegi szakaszában sikerült az energia-szinteket megfeleltetni bizonyos periódikus pályáknak és osztályozni őket. Eredményeink kiindulási alapként szolgálhatnak a további kutatásokhoz és új jelenségek kimutatására is esély van. Ugyanakkor, ma már folynak mind kísérleti [57], mind elméleti [32, 58] kutatások nagy mágneses térben helyezett N-S rendszereken. Az itt vázolt eredmények ehhez az irányvonalhoz kapcsolódnak.

A kísérletnek megfelelő geometriai elrendezés az 1.2b ábrán látható. A konstans B mágneses teret z irányban, merőlegesen a diszk síkjára választjuk és a Meissner-effektusnak megfelelően zérusnak vesszük a szupravezető részben. Ekkor a vektorpotenciálnak szimmetrikus mértékben és (r, φ) polár-koordinátákban csak A_φ komponense van, és csak r függvénye [60]:

$$A_\varphi(r, \varphi) = B \frac{r^2 - R_S^2}{2r^2} \Theta(r - R_S), \quad (1.20)$$

ahol $\Theta(x)$ a Heaviside-függvény. A rendszer energiaszintjeit az (1.3) Bogoliubov–de Gennes-egyenletből kaphatjuk meg. Az N-S rendszer a diszkek középpontján átmenő z tengely körül forgászimmetrikus. Az L_z impulzusmomentum felcserélhető a Hamilton-operátorral, ezért közös a sajátfüggvényük. Így a Ψ hullámfüggvény szeparálható, a φ függő részét $e^{im\varphi}$ alakban kereshetjük. A kapott radiális egyenletet az N és az S tartományban külön-külön oldjuk meg. A radiális hullámfüggvényeket az (1.4) határfeltételek szerint illesztjük $r = R_S$ határon. A számítás menete hasonló az 1.2.1 szakaszban tárgyalt diszk esethez. A különbség az, hogy az N részben a radiális hullámfüggvény a mágneses tér esetén a konfluens hypergeometrikus függvényekkel [50] (gyakran Kummer-függvényeknek is nevezik) fejezhető ki. A részletes számítások megtalálhatók a [A5] cikkünkben.

Továbbiakban feltesszük, hogy az N-S határfelület tökéletes, azaz a Fermi-energia és az effektív tömegek azonosak az N és S tartományban, és az N-S határfelületen nincs semmilyen potenciálgát. A probléma szemiklasszikus kezelése érdekében a szekuláris egyenletben fellépő Kummer-függvényeket az ismert WKB (Wentzel–Kramers–Brillouin) módszerrel közelíthetjük [59]. A radiális hullámfüggvények az N tartományban egy egydimenziós Schrödinger-egyenlet megoldásai, melyben a radiális

potenciál:

$$V_m^{(\pm)}(\tau) = (\tau^2/2 - m_{\pm})^2/\tau^2, \quad (1.21)$$







ahol \pm az elektron-/lyuk-szerű gerjesztéseknek felelnek meg, $m_{\pm} = R_S^2/(2l^2) \pm m \operatorname{sgn}(eB)$, $\tau = r/l$ a dimenziótlán radiális koordináta és $l = \sqrt{\hbar/|eB|}$ a mágneses hossz ($\operatorname{sgn}(x)$ az előjelfüggvényt jelöli). Az esetünkben szükséges számítások a mágneses térben mozgó elektronok Schrödinger-egyenletének WKB módszerrel történő megoldásának (lásd [61–63]) a kiterjesztése elektronokra és lyukakra.

Adott E energián a radiális potenciálnak két fordulópontja van mind az elektronra, mind a lyukra (\pm):

$$\tau_{1,2}^{\pm} = \sqrt{2(\nu_{\pm} + m_{\pm}) \mp 2\sqrt{\nu_{\pm}(\nu_{\pm} + 2m_{\pm})}}, \quad (1.22)$$

ahol $\nu_{\pm} = 2(E + E_F)/(\hbar\omega_c)$ és az előjel a második négyzetgyök előtt az első/második fordulópontot adja (a \pm felső index az elektronra/lyukra vonatkozik és $\omega_c = eB/m^*$ a ciklotron frekvencia és m^* az elektron effektív tömege). Megjegyezzük, hogy $\tau_1^{\pm} < \tau_2^{\pm}$, és a fordulópontok valós számok, ha vagy $m_{\pm} > 0$ vagy $\nu_{\pm} \geq 2m_{\pm}$ for $m_{\pm} < 0$.

A fordulópontok relatív helyzete a $\tau_S = R_S/l$ és $\tau_N = R_N/l$ -hez viszonyítva lehetőséget nyújt a különböző lehetséges klasszikus pályák osztályozására. Az egyes pályákat az A, B, C és D betűkkel, és a $+/-$ előjelekkel indexeljük. Az indexek ismét azt jelölik, hogy az adott pályán elektron vagy lyuk halad. A betűkkel jelezzük, hogy a pálya érintkezik a belső és/vagy a külső körrel vagy egyikkel sem. Az A típusú pálya esetében a pálya egyik körrel sem érintkezik, ezek a Landau-állapotoknak megfelelő ciklotron pályák. A B típusú pályák az ún. pattogó (skipping) pályák. Zérus mágneses tér esetén ezeket neveztük suttogó pályáknak (lásd az 1.4.1 részt). A másik két betűnek megfelelő pályák mindegyike eléri az N-S határt. A C típusú pálya esetében a pálya csak a belső kört (az N-S határt) érinti, míg a D típusú pálya érinti mind a belső, mind a külső kört. Az egyes pályákat és a hozzákapcsolódó feltételeket az 1.1 táblázatban foglaltuk össze. A szupravezető tartományban a hullámfüggvény megegyezik a mágne-

pálya típusa	A_+	B_+	C_+C_-	D_+D_-	D_+C_-	C_+D_-
						
feltételek	$\tau_S < \tau_1^{\pm}$ $\tau_2^{\pm} < \tau_N$	$\tau_S < \tau_1^{\pm}$ $\tau_N < \tau_2^{\pm}$	$\tau_1^{\pm} < \tau_S$ $\tau_2^{\pm} < \tau_N$	$\tau_1^{\pm} < \tau_S$ $\tau_N < \tau_2^{\pm}$	$\tau_1^{\pm} < \tau_S$ $\tau_2^- < \tau_N$ $\tau_N < \tau_2^+$	$\tau_1^{\pm} < \tau_S$ $\tau_2^+ < \tau_N$ $\tau_N < \tau_2^-$

1.1. táblázat. Az egyes pályák osztályozása. A folytonos/szaggatott vonalak jelölik, hogy a pályán elektron/lyuk halad.

ses tér nélküli esettel (lásd az 1.2.1 szakaszt). A megfelelő WKB hullámfüggvényeket behelyettesítve a szekuláris egyenletbe és feltételezve, hogy R_S sokkal nagyobb, mint a koherenciahossz a szemiklasszikus kvantálási feltétel a következő alakú:

$$\Phi_m(\varepsilon) = n + \mu, \quad (1.23)$$

ahol n egész szám, a $\Phi_m(\varepsilon)$ fázis és a μ Maslov-index az 1.2 táblázatban található. Az

	$\Phi_m(\varepsilon)$	μ
A_{\pm}	$S_m^{(\pm)}(\tau_2^{\pm}, \tau_1^{\pm})$	$\frac{1}{2}$
B_{\pm}	$S_m^{(\pm)}(\tau_N, \tau_1^{\pm})$	$\frac{3}{4}$
C_+C_-	$S_m^{(+)}(\tau_2^+, \tau_S) - S_m^{(-)}(\tau_2^-, \tau_S) - \frac{1}{\pi} \arccos \frac{E}{\Delta_0}$	0
D_+D_-	$S_m^{(+)}(\tau_N, \tau_S) - S_m^{(-)}(\tau_N, \tau_S) - \frac{1}{\pi} \arccos \frac{E}{\Delta_0}$	0
D_+C_-	$S_m^{(+)}(\tau_N, \tau_S) - S_m^{(-)}(\tau_2^-, \tau_S) - \frac{1}{\pi} \arccos \frac{E}{\Delta_0}$	$\frac{1}{4}$
C_+D_-	$S_m^{(+)}(\tau_2^+, \tau_S) - S_m^{(-)}(\tau_N, \tau_S) - \frac{1}{\pi} \arccos \frac{E}{\Delta_0}$	$-\frac{1}{4}$

1.2. táblázat. Különböző pályák esetén a $\Phi_m(\varepsilon)$ fázisok és Maslov-indexek a (1.23) szemi-klasszikus kvantálási feltételben. Az $S_m^{(\pm)}$ radiális hatás az (1.24a) egyenletből kapható.

elektron és a lyuk radiális hatása ($\hbar/2$ egységekben) tetszőleges τ_1 és τ_2 pont között:

$$S_m^{(\pm)}(\tau_2, \tau_1) = \Theta_m^{(\pm)}(\varepsilon, \tau_2) - \Theta_m^{(\pm)}(\varepsilon, \tau_1) \quad , \quad (1.24a)$$

ahol

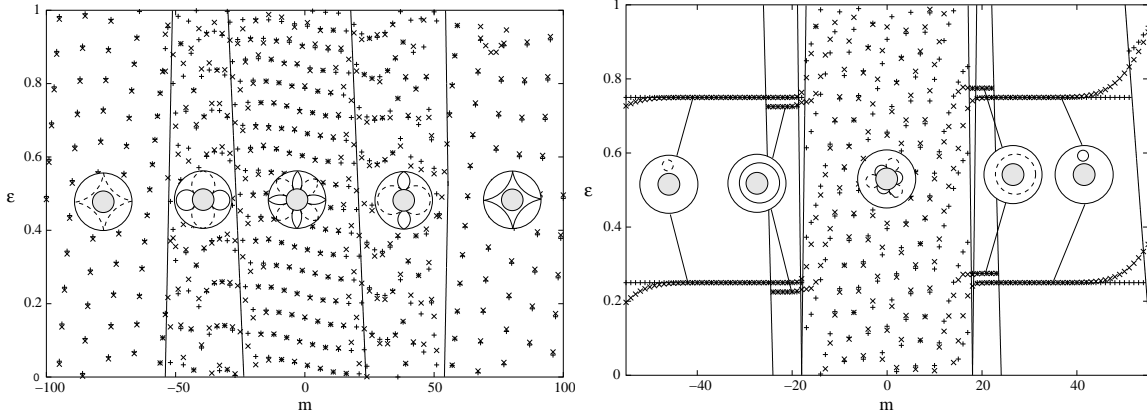
$$\begin{aligned} 2\pi\Theta_m^{(\pm)}(\varepsilon, \tau) &= \sqrt{\tau^2\nu_{\pm} - \left(\frac{\tau^2}{2} - m_{\pm}\right)^2} \\ &\quad - (\nu_{\pm} + m_{\pm}) \arcsin \left(\frac{\nu_{\pm} + m_{\pm} - \tau^2/2}{\sqrt{\nu_{\pm}(\nu_{\pm} + 2m_{\pm})}} \right) \\ &\quad - |m_{\pm}| \arcsin \left(\frac{\tau^2(\nu_{\pm} + m_{\pm}) - 2m_{\pm}^2}{\tau^2\sqrt{\nu_{\pm}(\nu_{\pm} + 2m_{\pm})}} \right). \end{aligned} \quad (1.24b)$$

Az A_{\pm} típusú ciklotron pályákra a fenti az (1.23) kvantálási feltételből a

$$\nu_{\pm} = 2n + 1 + |m_{\pm}| - m_{\pm}, \quad (1.25)$$

energiaszinteket kapjuk. Ezek megegyeznek a jól ismert Landau-szintekkel elektron/lyuk esetében.

A numerikus számítások során a kísérleti szituációnak megfelelően a következő parametereket célszerű használni: $k_F R_S$, ahol k_F a Fermi hullámszám vektor, $\Phi_{\text{miss}} = BR_S^2 \pi$ a Meissner-effektus miatt hiányzó mágneses fluxus, R_S/R_N , és Δ_0/E_F . Az 1.10 ábrán az egzakt kvantumos és a szemiklasszikus számolások eredményeit hasonlítjuk össze két különböző rendszerre. Az ábrákból nyilvánvaló, hogy a szemiklasszikus közelítés kitűnő egyezésben van az egzakt számolással (a + és az x jelek a jó egyezésnél egymásra ülnek, és így ott egy * jel látható). Az 1.10 bal oldali ábráján a mágneses tér elég kicsi ahhoz, hogy a ciklotron sugár nagyobb, mint R_N és így nem létezik A_{\pm} típusú (ciklotron) pálya. Ugyanakkor a jobb oldali ábrán az energiaspektrumot olyan



1.10. ábra. Egzakt (x) és a szemiklasszikus (+) energiaszintek (Δ_0 egységekben) az m kvantumszám függvényében. A paraméterek (bal/jobbi oldali ábrán): $k_F R_S = 54.0/18.0$, $\Phi_{\text{miss}} = 36.5/4.05$, $R_S/R_N = 0.45/0.15$ és $\Delta_0/E_F = 0.1$. A folytonos vonalak a különböző típusú pályák határát jelölik az ϵ, m síkon. Ezeket a vonalakat 1.1 táblázatban adott feltételekből kaphatjuk. Kényelmi okokból az ábrán berajzoltuk a megfelelő pályákat is.

nagy mágneses tér esetén számoltuk ki, amelyre megjelennek a diszperzió nélküli (m -től független energiák) Landau-nívók. Kisebbségi eltérés látható az A_{\pm} típusú pályák határán.

A kísérletekben [52] kis mágneses teret alkalmaztak: $\Phi_{\text{miss}} = 0.15h/e$. A geometria adatokból és a Fermi-energiából $R_S/R_N = 0.7$ and $k_F R_S = 10^5$ adódik. A ciklotron sugár jóval nagyobb, mint R_N , és így csak B_{\pm} és $D_{+}D_{-}$ típusú pályák léteznek szemiklasszikus közelítésben. Egy egyszerűsített modellben Bruder és Imry [53] ezeket a pályákat vette számításban. Ezeknek megfelelő energiák adnak járulékokat a szabad-energiához illetve a szuszceptibilitáshoz. Azonban a kísérleti eredmények teljes magyarázatához a fenti számolást ki kell egészíteni például a Meissner-effektus pontosabb figyelembe vételével. Egy lehetséges mód a [64] cikkben található. Hasonlóan, a bulk szupravezető gap fölötti energiaszintek is járulékokat adnak a termodinamikai mennyiségekhez. Ezeket a szinteket gap alatti szekuláris egyenlet analitikus kifejtésével kaphatjuk meg. A felületek durvasága (a kísérletekben soha sem pontosan kör alakú a minta) várhatóan elhanyagolható, ha durvaság amplitúdója sokkal kisebb az elektron de-Broglie hullámhosszánál. A fent bemutatott elmélet kiindulási alapja lehet a kísérleti eredmények értelmezésének. Másrészt, egy új kutatási területet nyithat az Andreev-biliárdok mágneses térben való vizsgálatához.

1.6. Ferromágneses-normál és szupravezető hibrid rendszerek

Ebben a fejezetben a [A6] cikkünkben közölt eredményeinket foglaljuk össze.

Az utóbbi években megnőtt az érdeklődés az olyan hibrid rendszerek iránt, melyekben egy ferromágneses (F) anyag szupravezetővel (S) kapcsolódik [65–72]. Az igen tiszta ferromágneses filmmel érintkező szupravezető F-S hibrid rendszerben a ferromágneses anyag kicserélődési kölcsönhatása alapvetően befolyásolja az F-S rendszer állapotsűrűséget. Az ilyen rendszereket mind kísérletileg [73], mind elméletileg [74, 75] tanulmányozták. A bulk szupravezető gap alatti Andreev-állapotok a kicserélődési kölcsönhatás miatt felhasadnak a spinállapotok szerint. Szemiklasszikus számításokkal megmutatták, hogy az állapotsűrűség értelmezhető a $P(s)$ klasszikus visszatérési valószínűség alapján. Ez utóbbi mennyiség csak az F-S rendszer és annak határfelületének geometriájától függ [74–76]. Azonban, a szemiklasszikus eredményeket nem hasonlították össze az egzakt kvantumos számolásokkal. Munkánk során tanulmányoztuk, hogy milyen feltételek mellett ad jó közelítést a szemiklasszikus számolás. Az egzakt számításokhoz az 1.2a ábrán látható box geometriát használtuk, azzal a különbséggel, hogy az N tartományt ferromágneses anyaggal cseréltük ki. Az 1.2 fejezetben tárgyalt módszert terjesztettük ki az F-S rendszerre. Levezettük az energiaspektrumot meghatározható egzakt szekuláris egyenletet. Ugyanakkor, ebből az egyenletből kiindulva az állapotsűrűségnek ugyanazt a szemiklasszikus kifejezését sikerült levezetni, amelyet korábban már más úton is levezettek [74]. Így lehetőségünk nyílt az egzakt és a szemiklasszikus számolás összehasonlítására. Kiderült, hogy a szemiklasszikus közelítés csak akkor ad jó eredményt, ha a kicserélődési kölcsönhatás sokkal kisebb a Fermi-energiánál. Ezért a korábbi szemiklasszikus számolásra alapozott következtetések csak korlátozott módon érvényesek [74, 75].

Először a kvantumos számolást ismertetjük. Az F-S rendszerre érvényes Bogoliubov–de Gennes-egyenlet a következő alakú:

$$\begin{pmatrix} H_0 - \sigma h(\mathbf{r}) & \Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta^*(\mathbf{r}) & -H_0 - \sigma h(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \Psi_\sigma = E \Psi_\sigma, \quad (1.26)$$

ahol $H_0 = \mathbf{p}^2/2m_{\text{eff}} + V(\mathbf{r}) - \mu$ az egyrészecskés Hamilton-operátor, $\mu = E_{\text{F}}^{(F)}, E_{\text{F}}^{(S)}$ a Fermi-energia, $m_{\text{eff}} = m_{\text{F}}, m_{\text{S}}$ az effektív tömeg az F és az S tartományban. Az F-S határfelületen lévő $V(\mathbf{r})$ potenciálgátat és a $h(\mathbf{r})$ kicserélődési energiát a szokásos módon modellezzük [65]: $V(x, y) = U_0 \delta(x)$ és $h(x, y) = h\Theta(x)$, ahol $\Theta(x)$ a Heaviside-függvény. A ferromágnesben a spinek irányát merőlegesnek vesszük az F-S hibrid síkjára. Végül a $\sigma = \pm 1$ a spin fel/le állapotokra utalnak. A szokásos feltevés szerint a Cooper-párok energiáját a $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta_0 \Theta(-x)$ alapján közelítjük [39, 65]. A szekuláris egyenletet a korábbiakhoz hasonlóan az F és S tartományban felírt hullámfüggvények illesztéséből az (1.4) egyenlet alapján kaphatjuk. A számítások nagyon hasonlóak az 1.2.1 szakaszban tárgyalt N-S box geometria esetéhez. A szekuláris egyenlet alakja is hasonló az (1.5) egyenlethez:

$$\text{Im} \{ \gamma_e D_{\text{m},\sigma}^{(e)}(E, h) D_{\text{m},\sigma}^{(h)}(E, h) \} = 0, \quad (1.27a)$$

ahol $\gamma_e = e^{i \arccos(E/\Delta_0)}$,

$$D_{m,\sigma}^{(e)}(E, h) = \left(Z - i \frac{m_F}{m_S} q_{m,\sigma}^{(e)} \right) \sin k_{m,\sigma}^{(e)} d + k_{m,\sigma}^{(e)} \cos k_{m,\sigma}^{(e)} d, \quad (1.27b)$$

$$D_{m,\sigma}^{(h)}(E, h) = \left(Z + i \frac{m_F}{m_S} q_{m,\sigma}^{(h)} \right) \sin k_{m,\sigma}^{(h)} d + k_{m,\sigma}^{(h)} \cos k_{m,\sigma}^{(h)} d, \quad (1.27c)$$

és a hullámszámvektorok a következő alakúak:

$$k_{m,\sigma}^{(e,h)} = k_F^{(F)} \sqrt{1 \pm \frac{E + \sigma h}{E_F^{(F)}} - \left(\frac{m\pi}{k_F^{(F)} W} \right)^2}, \quad (1.27d)$$

$$q_{m,\sigma}^{(e,h)} = k_F^{(S)} \sqrt{1 \pm i \frac{\sqrt{E^2 - \Delta_0^2}}{E_F^{(S)}} - \left(\frac{m\pi}{k_F^{(S)} W} \right)^2}. \quad (1.27e)$$

Itt $k_F^{(F)}$ és $k_F^{(S)}$ a Fermi hullámszám az F és S tartományban. A normalizált potenciálgát $Z = 2m_F U_0 / \hbar^2$, a propagáló módusok száma $M_\sigma^{(e,h)} = \left[M \sqrt{1 \pm (E + \sigma h) / E_F^{(F)}} \right]$, ahol $M = k_F W / \pi$ és $[\cdot]$ az egészrészt jelöli. Adott m és σ mellett az (1.27a) egyenlet megoldása adja az F-S box rendszer energiaszintjeit az $E < \Delta_0$ energiatartományban.

Az állapotsűrűség szemiklasszikus kifejezését a fenti szekuláris egyenletből vezethetjük le. Feltesszük, hogy a határfelület tökéletes, azaz $m_F = m_S$, $E_F^{(F)} = E_F^{(S)}$ és $Z = 0$. Andreev-közelítésben (ha $|E + \sigma h| \ll E_F$) a hullámszámvektorokat közelíthetjük: $k_{m,\sigma}^{(e,h)} \approx q_{m,\sigma}^{(e,h)}$ és ekkor $D_{m,\sigma}^{(e)}(E, h) \approx k_{m,\sigma}^{(e)} e^{-ik_{m,\sigma}^{(e)} d}$. Ebben az esetben az (1.27a) kvantálási feltétel egyszerűsíthető:

$$I_{m,\sigma}(E) \equiv \frac{\left(k_{m,\sigma}^{(e)} - k_{m,\sigma}^{(h)} \right) d - \arccos(E/\Delta_0)}{\pi} = n, \quad (1.28)$$

ahol n egy egész szám. Az állapotsűrűség a bulk gap alatt ($|E| \leq \Delta_0$):

$$\varrho(E) = \sum_{\sigma=\pm 1} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=1}^{M_0} \delta(E - E_{mn,\sigma}), \quad (1.29)$$

ahol $E_{mn,\sigma}$ értékek a szekuláris egyenlet megoldásai. További átalakítások után (a részleteket illetően lásd [A6]) az állapotsűrűség kapcsolatba hozható a $P(s)$ visszatérési valószínűséggel:

$$\varrho(E) = \sum_{\sigma=\pm 1} \frac{M}{|E + \sigma h|} \sum_{n=-\infty}^{\infty} [s_{n,\sigma}(E) + \xi_c(E)] P(s_n(E)), \quad (1.30a)$$

ahol a $P(s)$ visszatérési valószínűség (érdekes módon) megegyezik az N-S box rendszernél kapott az (1.12) kifejezéssel, $\xi_c(E) = \xi_0 / \sqrt{1 - E^2 / \Delta_0^2}$ és

$$s_{n,\sigma}(E) = \frac{n\pi + \arccos(E/\Delta_0)}{(E + \sigma h) / \Delta_0} \xi_0. \quad (1.30b)$$

Itt $\xi_0 = \hbar v_F / \Delta_0$ a bulk szupravezetőben a koherenciahossz. A $P(s)$ normált, azaz $\int_0^\infty P(s)ds = 1$. Látható, hogy az állapotsűrűséget egy klasszikus mennyiséggel lehet kifejezni. Az egzakt és a szemiklasszikusan kapott energiaszintek összehasonlítása érdekében célszerű az $N(E)$ lépcsőfüggvényt kiszámolni. Az integrált állapotsűrűség: $N(E) = \int_0^E dE' \varrho(E')$. Az (1.30a) egyenletből kapjuk

$$N(E) = M \sum_{n=-\infty}^{\infty} [F_n^{(a)}(E) + F_n^{(b)}(E)], \quad (1.31)$$

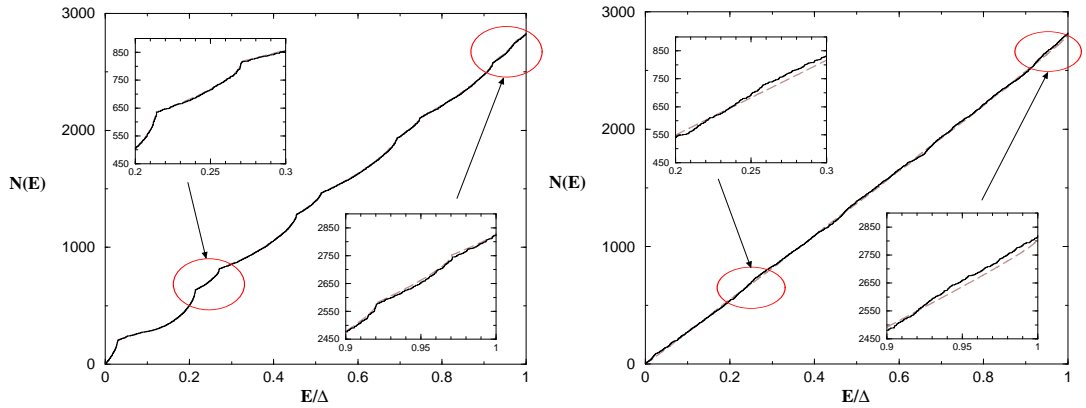
ahol

$$F_n^{(a)}(E) = F[s_{n,+1}(0)] - F[s_{n,+1}(E)], \quad (1.32)$$

$$F_n^{(b)}(E) = \begin{cases} 1 - F[s_{n,-1}(0)] - F[s_{n,-1}(E)], & \text{ha } E > h \\ -F[s_{n,-1}(0)] + F[s_{n,-1}(E)], & \text{máskülönben,} \end{cases} \quad (1.33)$$

és $F(s) = \int_0^s P(s')ds' = \Theta(s - 2d) \sqrt{1 - 4d^2/s^2}$. Megjegyezzük, hogy $F(\infty) = 1$ mivel $P(s)$ egyre normált.

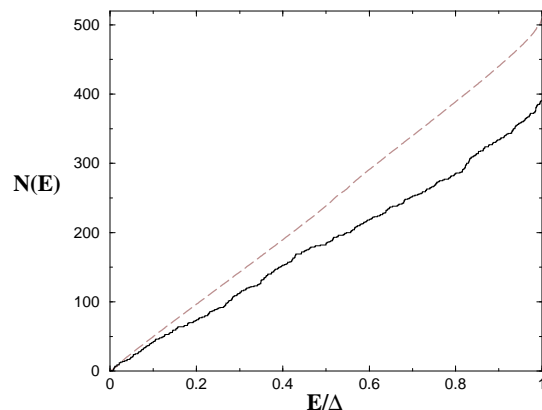
A fentiek alapján össze tudjuk hasonlítani az egzakt és a szemiklasszikus számolásból kapott energiaspektrumot. Numerikus eredmények láthatók az 1.11 ábrán két különböző h kicserélődési energia esetén. A szemiklasszikus számolásban a kis paraméter a h/E_F , mely mindkét esetben kicsinek tekinthető. Látható az ábrákból,



1.11. ábra. Az egzakt kvantummechanikai (folytonos vonal) és a szemiklasszikus (szaggatott vonal) közelítésből kapott lépcsőfüggvények a Δ_0 szupravezető gappal normalizált energia függvényében. A bal/jobbi oldali ábrákon $\frac{h}{\Delta_0} = 0.1/10.0$ (azaz $\frac{h}{E_F} = 0.0025/0.25$), míg a többi paraméter azonos: $M = 217.7$, $\frac{d}{W} = 0.7$, $\frac{\Delta_0}{E_F} = 0.025$. Az ábrabetétek a függvények egyes részeinek kinagyított változatait mutatják.

hogy a szemiklasszikusan kapott eredmények nagyon jól egyeznek az egzakt számolásokkal.

Tovább növelve h értékét már megfigyelhetjük, hogy a szemiklasszikus közelítés elromlik. Az 1.12 ábrán $h/\Delta_0 = 40$, azaz $h/E_F = 1.0$. Jól látható a kétféle számolás közti különbség. Megállapíthatjuk, hogy a szemiklasszikus közelítés jól alkalmazható, ha a h kicserélődési energia kicsi a Fermi-energiához képest. Ugyanakkor h lehet



1.12. ábra. Az egzakt kvantummechanikai (folytonos vonal) és a szemiklasszikus (szaggatott vonal) közelítésből kapott lépcsőfüggvények a Δ_0 szupravezető gappal normalizált energia függvényében. Az ábrán $\hbar/\Delta_0 = 40.0$ (azaz $\hbar/E_F = 1.0$), míg a többi paraméter ugyanaz, mint a 1.11 ábrán.

összemérhető, sőt nagyobb, mint a bulk Δ_0 gap. Bonyolultabb geometria esetén az állapotsűrűség szemiklasszikus (1.30a) kifejezése továbbra is érvényes, csak a $P(s)$ visszatérési valószínűség módosul az adott geometriának megfelelően. Ebben az esetben $P(s)$ könnyen számolható a korábbi példákhoz hasonlóan Monte Carlo módszerrel.

Összefoglalva, ebben a fejezetben a normál-szupravezető hibrid rendszereket tanulmányoztuk, melyekben az alapvetően meghatározó fizikai folyamat az ún. Andreev-reflexió. Összehasonlítottuk a kvantumosan és szemiklasszikusan számolt integrálható, pszeudo-integrálható és kaotikus Andreev-biliárdok energiaspektrumát, és minden esetben kitűnő egyezést kaptunk. Hasonló vizsgálatokat végeztünk mágneses térbe helyezett Andreev-biliárdban, illetve ferromágnes-szupravezető hibrid rendszerben is. A szemiklasszikus eljárás lehetőséget nyújt az alapvető fizikai folyamatok mélyebb megértéséhez, és kiindulópontja lehet más fizikai mennyiségek kiszámításához is. Az Andreev-biliárdok energiaspektruma lényegesen eltér a kvantumkáosz kapcsán, a 80-as években intenzíven kutatott, kétdimenziós elektrongázban megvalósított biliárdok spektrumának tulajdonságaihoz képest. Így a fejezetben tanulmányozott rendszerek alapjai lehetnek a kvantumkáosz kutatási területének kiterjesztéséhez is.

2. fejezet

Spintronika

2.1. A spintronika alapjai

A fejezet megírásánál részben a [A17, A18] cikkeimet is felhasználtam.

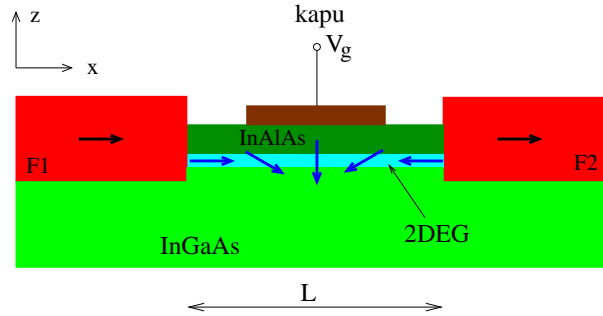
A fizikusok 2002-ben ünnepelték *Paul Dirac* születésének századik évfordulóját. Dirac elmúlt századunk egyik legmeghatározóbb fizikusa volt, akinek sikerült egyesíteni a fizika két alapvető elméletét: a kvantummechanikát és a speciális relativitáselméletet. Az *Erwin Schrödinger* és *Werner Heisenberg* által kidolgozott kvantummechanikában még nem szerepelt a spin. Ezt *Wolfgang Pauli* nyomán külön be kellett építeni az elméletbe. A Dirac által megalapozott *relativisztikus kvantummechanika* már tartalmazta a spint. Dirac még nem láthatta előre, hogy az elektron spinje megváltoztathatja az egész elektronikát. Napjainkban a fizikának egy új területe, a *spintronika* (az angol *spintronics* szó alapján) van születőben.

Maga a szó egyfajta szójáték, az elektronika szóból a spin szerepét kiemelve alkotott új szó. A hagyományos elektronikai eszközök működése az elektronok töltéstranszportján alapul. A spinnek nincs szerepe a működésben, a töltések száma és energiája határozza meg az eszköz viselkedését. Ugyanakkor az elképzelések szerint sokkal hatékonyabb eszközök készíthetők, ha sikerül kontrollálni az elektronok spinjét is. Olyan logikai eszközök készíthetők, melyek sokkal gyorsabbak és kevesebb hőtermelnek, azaz hűtésük könnyebben megoldható. Ráadásul a sokat emlegetett, de a gyakorlatban sajnos még nem működő *kvantumszámítógépek* félvezető alapú megvalósításában is a spin játszaná az alapvető szerepet. A jelenleg alapkutatási szakaszban járó kísérletek ígéretes gazdasági haszonnal kecsegtetnek, évi százmilliárd dolláros piacot jósolnak az elemzők.

Az elmúlt években rohamosan nőtt a számítógépek memóriájának kapacitása, ami lehetővé tette a gépek méretének csökkentését, a laptopok, a pendrive-ok, illetve különféle MP3 lejátszók elterjedését. Ma már otthoni használatú eszközök memóriája elérheti a terabyte-ot (1000 milliárd byte) is. Az egyre kisebb méretű és egyre nagyobb tárolókapacitású diszkeken lévő információk kiolvasásához új fizikai elven működő leolvasó fejekre volt szükség. A mai olvasófejek készítése a 2007. évi fizikai Nobel-díjjal jutalmazott két fizikusnak, *Baibich* és *Barnas* közel húsz évvel ezelőtti felfedezésén, egy új fizikai effektuson, az *óriás mágneseses ellenálláson* (az angol *giant magnetoresistance* szó alapján, rövid. *GMR*) alapul [77]. A GMR effektus az elektromos ellenállásnak a külső mágneses tér okozta változásával kapcsolatos egy olyan szendvics szerkezetben,

amelyben ferromágneses és nem-mágneses rétegek felváltva követik egymást. Az óriás mágneseses ellenállás felfedezése utat nyitott annak a viharosan fejlődő új technológiának, ami lehetővé tette a merevlemezek miniaturizálását, és egy kutatási területnek, a spintronika születésének. A GMR effektusról nemrég jelent meg magyar nyelvű áttekintés a Fizikai Szemle [78], illetve a Természet Világa hasábjain [A18]. Hasonlóan, a spintronikáról is jelent meg magyar nyelvű ismeretterjesztő cikk [A17].

Nem sokkal a GMR effektus felfedezése után az amerikai Purdue Egyetemen dolgozó *Supriyo Datta* és *Biswajit Das* egy új típusú *térvezérlésű tranzisztort* (field-effect transistor, FET) javasolt, amelynek a működésében kihasználják a spin szerepét, miközben az elektron a két félvezető határfelületén mozogva nem szenved a spinállapotát megváltoztató ütközéseket [79] (lásd a 2.1. ábrát). Az alább ismertetett eszköz igen ígéretes,



2.1. ábra. Datta-Das spintranzisztor sematikus ábrája oldalnézetben. Az F1 *forrás* (source) és az F2 *nyelő* (drain) elektródák ferromágneses anyagok, a mágnesezettségük irányát a nyíl mutatja. A *kapuelektrodára* (gate electrode) kapcsolt V_g feszültséggel változtathatjuk az InGaAs és InAlAs félvezetők határán, a kétdimenziós elektrongázra merőleges irányban ható külső elektromos teret. Az elektronok a forrás és a nyelő elektróda között L utat tesznek meg, miközben spinjük iránya az $x-z$ síkban (az ábrán erősen felnagyítva) a megtett úttal arányos mértékben elfordul (lásd a szöveget).

de a gyakorlati megvalósítása még várat magára. Az elektronok az InGaAs és InAlAs félvezetők határfelületén egy ún. *kétdimenziós elektrongáz* (2DEG) keletkezik. Ha a FET kapuelektrodájára feszültséget kapcsolunk, a kialakuló elektromos tér segítségével kontrollálhatjuk az elektronok spinjének az irányát. Modulált áram jön létre. Az alapötlet szépsége, hogy a *spin-FET* elvben elkészíthető a mikroelektronika hagyományos módszereivel. Nem meglepő, hogy a *Datta-Das tranzisztor* mintául szolgál a félvezető spintronikának, és világszerte a terület egyik legaktívabban kutatott témája lett.

A spin irányának elektromos térrel történő hangolásának megértéséhez a Dirac-egyenlethez kell visszanyúlnunk. A relativisztikus kvantummechanika Dirac-egyenlete a nem-relativisztikus Schrödinger-egyenlethez képest egy új tagot tartalmaz, amely összekapcsolja az elektronok térbeli mozgását a spin irányának változásával és *spin-pálya kölcsönhatásnak* neveznek. Megmutatható, hogy a Dirac-egyenlet gyengén relativisztikus esetre vonatkozó sorfejtéséből ($1/c$ hatványai szerint) egy tetszőleges V elektrosztatikus potenciál hatására a vákuumbeli elektronok Pauli-egyenletében megjelenik egy extra, a spin-pálya kölcsönhatást leíró tag (lásd például [80,81]):

$$\hat{H}_{so} = \frac{\hbar}{(2m_e c)^2} \boldsymbol{\sigma} (\text{grad } V \times \hat{\mathbf{p}}) = -\frac{\hbar}{(2m_e c)^2} \text{grad } V (\boldsymbol{\sigma} \times \hat{\mathbf{p}}), \quad (2.1)$$

ahol $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ az elektron impulzus-operátora, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ a Pauli-mátrixokból képzett vektor, míg m_e az elektron tömege és c a fénysebesség. Figyelembe véve a kristálypotenciálból származó spin-pálya kölcsönhatást keskeny tiltott sávú III-V félvezetőkben a *Kane-modell* [82] jól írja le az elektronok vezetési sávját, a nehéz lyukak (heavy hole), a könnyű lyukak (light hole), illetve a leszakadt lyukak (split off hole) vegyértéksávjait. A szimmetriamegfontolásokon alapuló Kane-modellben az effektív Hamilton-operátor 8 x 8-as mátrix-operátor [83,84]. A modellben szereplő paraméterek általában kísérleti eredményekhez való illesztéssel vagy pontosabb, elsősorban alapuló sávszerkezet-számításból határozhatók meg [84–86].

A Kane-modellből levezethető egy effektív 2 x 2-es Hamilton-operátor, ami az elektronok dinamikáját írja le különböző félvezető anyagokból készített, rétegzett kétdimenziós heteroszerkezet határán figyelembe véve a spin-pálya kölcsönhatást is [86,87]. Mivel ezt az operátort először, 1960-ban az orosz származású, ma az Egyesült Államokban élő elméleti fizikus, *Emmanuel Rashba* vezette le, ma *Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatásnak* nevezik, és az irodalomban nagyon gyakori kiinduló modell a spintronikai jelenségek magyarázatára [88,89]. Kvalitatíve arról van szó, hogy a heteroszerkezetben a határfelületre merőleges irányú (lásd a 2.1. ábrát) elektromos térrel a (2.1) egyenletben szereplő V potenciált lehet változtatni. A Hamilton-operátor a következő alakú:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{\alpha}{\hbar} \hat{U}, \text{ ahol} \quad (2.2a)$$

$$\hat{H}_0 = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*}, \quad \hat{U} = \sigma_x p_y - \sigma_y p_x, \quad (2.2b)$$

és m^* az elektron effektív tömege a 2DEG-ben, α pedig a Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás erőssége, másnéven Rashba-csatolás. Az első tag az elektron szokásos kinetikus energiája a 2DEG-ben, míg a második tag írja le a Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatást. Az α mennyiség arányos a heteroszerkezetben a határfelületre merőleges irányú elektromos térrel (grad V -vel), így a 2.1. ábrának megfelelően a kapuelektrodára kapcsolt V_g feszültséggel könnyen szabályozhatjuk. Az arányossági tényező a félvezető szerkezet jellemzőitől függ. A véges α mennyiség a félvezető anyag inverziós asszimmetriájából ered, és realiztikusabb modellekből (például a Kane-modellből [86]) vagy mérésekből (lásd például [90]) határozható meg. Az utóbbi időben a minél nagyobb Rashba-csatolással rendelkező anyagok keresése érdekében mind kísérletileg, mind elméletileg komoly erőfeszítéseket tettek a kutatók. Úgy tűnik, hogy a Rashba-csatolás az InAs alapú félvezetőkben a legnagyobb.

A részletek mellőzése nélkül, csak a hivatkozásokra utalva a 2.1 táblázatban felsoroltunk még néhány félvezető modellezére alkalmas Hamilton-operátort, melyeket gyakran használnak spintronikai kutatásokban.

Visszatérve a Rashba-féle Hamilton-operátorra egy fiktív \mathbf{B}_R mágneses tér bevezetésével a (2.2) alak formálisan az alábbi módon írható át:

$$\hat{H} = B_0 \mathbf{1} + \mathbf{B}_R \cdot \boldsymbol{\sigma}, \text{ ahol} \quad (2.3a)$$

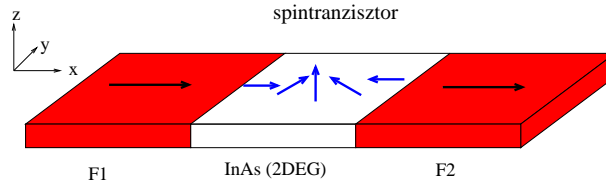
$$B_0 = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*} \text{ és } \mathbf{B}_R = \frac{\alpha}{\hbar} \begin{pmatrix} p_y \\ -p_x \end{pmatrix}. \quad (2.3b)$$

A rendszer	Hamilton-operátor	Irodalmi hivatkozás
Rashba-Dresselhaus	$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\alpha}{\hbar} (p_x \sigma_y - p_y \sigma_x) + \frac{\beta}{\hbar} (p_y \sigma_y - p_x \sigma_x)$	[96, 98–100]
Nehéz lyukak kvantum gödörben	$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + i \frac{\tilde{\alpha}}{2\hbar^3} (p_-^3 \sigma_+ - p_+^3 \sigma_-)$	[99–101]
Tömbi Dresselhaus	$\frac{\gamma_D}{\hbar^3} [\sigma_x p_x (p_y^2 - p_z^2) + \sigma_y p_y (p_z^2 - p_x^2) + \sigma_z p_z (p_x^2 - p_y^2)]$	[96, 100]

2.1. táblázat. Különböző típusú félvezetőknek az irodalomban gyakran használt Hamilton-operátora. További részletek találhatóak az adott rendszerről az utolsó oszlopban lévő hivatkozásokban.

A \mathbf{B}_R hipotetikus mágneses teret *Rashba-térnek* is nevezik, és merőleges az elektron terjedési irányára ($\mathbf{B}_R \perp \mathbf{p}$) és a külső elektromos tér irányára is (itt most a z irány).

A Datta-Das tranzisztor 2.1. ábrán vázolt elrendezésében az elektronok az x irányban mozognak a forrásból a nyelő felé, és így a \mathbf{B}_R Rashba-tér $-y$ irányú lesz (a papír síkjára merőlegesen kifelé mutat). A tér az elektronok spinjének a forgását eredményezi, amelyet sematikusan a 2.1. ábra mutat, a spinvektor az $x-z$ síkban forog. Az elméleti számolások szerint a spinvektor elfordulásának szöge arányos a Rashba-térrel¹ és az elektron által megtett L úthosszal [79]. Mivel a Rashba-tér arányos a kapufeszültséggel, az elektron spinjének végső irányát a kapufeszültséggel hangolhatjuk. Ha a forrás és a nyelő elektródákat ferromágneses anyagból készítjük, akkor a forrásból kilépő elektron spinje kezdetben a ferromágneses anyag mágnesezettségének irányával egyezik meg (a jobb megértés érdekében lásd a 2.2. ábrát, amely lényegében a 2.1. ábra egy másik nézetben). A nyelő elektródába belépő elektronok száma, az áram a spin végső



2.2. ábra. A spintranzisztorban a baloldali F1 ferromágnesből (forrásból) belépő elektron az x irányban mozog, ugyanakkor spinjének iránya az $x-z$ síkban forog, miközben az elektron eléri a F2 ferromágnes (nyelőt).

iránya és a nyelő elektródában lévő mágnesezettségének iránya közti szögtől függ. A spin-FET ellenállása külső mágneses tér nélkül, a könnyen kezelhető elektromos térrel hangolható.

A Datta és Das által javasolt és nagyon ígéretesnek tűnő spintranzisztort — annak ellenére, hogy óriási lendületet adott a kísérleti és elméleti kutatások terén — még nem sikerült megvalósítani. Ennek elsősorban három fő akadálya van: i) a spin *injektálása*, azaz a ferromágneses elektródából kilépő elektronok azonos irányba való ál-

¹Az elfordulás szöge $2\pi L/L_{so}$, ahol $L_{so} = \pi/k_{so}$ a spinprecessziós hossz, és k_{so} definícióját e szakasz végén, a (2.4) egyenletben adtuk meg.

lítása, polarizálása; ii) a spin *manipulálása*, más szóval annak biztosítása, hogy a mozgó elektron spinjének az iránya változatlan maradjon illetve külső eszközzel változtatható legyen; és iii) a spin *detektálása*, azaz a spin végső irányának mérése. Ferromágneses anyagból kilépő és a félvezetőbe belépő elektronok spinje a határfelületen irányt változtathat, és így a *spinpolarizált* elektronok (olyan elektronok, melyeknek a spinje azonos irányú) száma jelentősen lecsökken, különösen szobahőmérsékleten. Jelenleg nem sikerült elegendően nagy spinpolarizáltságot megvalósítani, ami a spintranzisztor hatékony működéséhez szükséges. Az elektronok terjedése közben a Rashba-tértől függetlenül és véletlenszerűen is változhat az elektronok spinjének az iránya. Ez a jelenség a spinfüggő szórás folyamatok miatt lép fel. Szerencsére a kísérletek szerint a *spincoherencia-hossz* (az elektron által megtett út, ami után a spin iránya véletlen módon megváltozik) nagyobb, mint 100 mikrométer. A mai nanotechnológiai lehetőségek mellett már ennél kisebb méretű heteroszerkezeteket is létre lehet hozni, és így ezen a téren az előrelépés ígéretesnek mondható. Kihasználva a félvezető-ferromágnes határán fellépő spinfüggő transzportfolyamatokat kézenfekvőnek látszik, hogy elektromos úton detektáljuk a nyelő elektródába belépő spinpolarizált elektronokat. Azonban a detektálás ma még hasonló nehézségekbe ütközik, mint az injektálás. A kutatók kísérleti és elméleti vonalon egyaránt óriási erőfeszítéssel igyekeznek megoldani a fenti problémákat.

A spintronika a korábban említett mezoszkopikus rendszerek természetes kiterjesztésének tekinthető abban az értelemben, hogy a központi szerep az elektron töltéséről a spinre tevődött át. A spintronikai eszközök alkalmazása számos előnnyel járna. A mai félvezető-eszközökhöz képest nagyobb adatátviteli sebességgel, kisebb fogyasztással működő és sokkal kisebb méretű spintronikai eszközöket lehetne gyártani. De talán a legígéretesebb alkalmazás a kvantumszámítógépek alapjául szolgáló *kvantumbit* (qubit) szilárdtestben való megvalósítása lenne. A kvantumbit két kvantumállapot szuperpozíciója, amelyek fizikai megvalósítására számos javaslat született, de az átütő siker még várat magára.

A spintronikáról számos áttekintő tanulmány készült [91–97]. Talán érdemes ismét megemlíteni Fabian és munkatársainak a közelmúltban megjelent kitűnő, oktató jellegű összefoglalóját, melyben további részletek találhatók a félvezető alapú spintronikáról [86].

Hazánkban is aktív kutatás folyik a tágabb értelemben vett spintronika területén, mint például az MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézetében (SZFKI) *Bakonyi Imre* és *Balogh Judit* csoportjának kísérleti kutatásai, illetve *Ujfalussy Balázs* elméleti kutatásai, az MTA Részecske és Magfizikai Kutatóintézetében (RMKI) *Nagy Dénes Lajos* és *Bottyán László* kísérleti kutatásai, az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetében (MFA) *Menyhárd Miklós* kísérleti kutatásai, illetve a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (BME) Fizikai Intézetében *Mihály György* és *Szunyogh László* elméleti kutatásai. E dolgozat szerzőjének két PhD hallgatója, Pályi András [102] és Péterfalvi Csaba is foglalkozik a spintronikával.

A következő két alfejezetben a spintronika két fontos kérdésével foglalkozunk: a Rashba-biliárd szint-statisztikájával, illetve a 2DEG-ben fellépő spinfüggő szórással. Azonban előtte — a továbbiak jobb megértése érdekében — vizsgáljuk meg a (2.2) Rashba-féle Hamilton-operátor tulajdonságait!

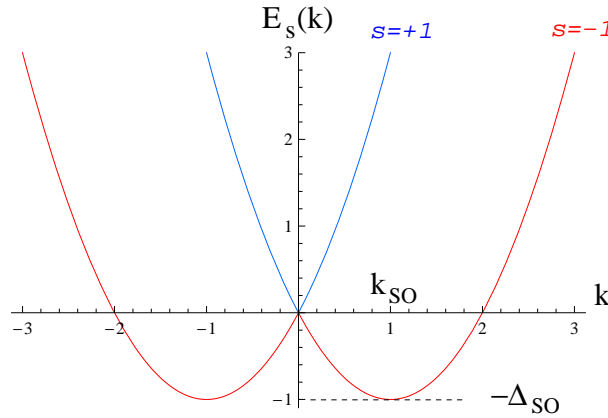
Az $\psi(\mathbf{r}) = (A, B)^T e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ kétkomponensű síkhullám anatzból kiindulva a $H\psi = E\psi$ Schrödinger-egyenletből a Rashba-féle Hamilton-operátor sajátértékeire egyszerű szá-

molással a következőt kapjuk:

$$E_s(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (|\mathbf{k}| + s k_{\text{so}})^2 - \Delta_{\text{so}}, \quad \text{ahol} \quad (2.4a)$$

$$k_{\text{so}} = m^* \alpha / \hbar^2 \quad \text{és} \quad \Delta_{\text{so}} = \hbar^2 k_{\text{so}}^2 / (2m^*). \quad (2.4b)$$

Itt $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ a hullámszám vektor, és az $s = \pm 1$ a két megoldást, a diszperziós reláció két ágát jelöli. A két diszperziós ág a 2.3 ábrán látható. Mivel a $E_s(\mathbf{k})$ diszperziós reláció csak a \mathbf{k} vektor nagyságától függ a (k_x, k_y) térben a diszperziós felületet úgy kapjuk, hogy a 2.3 ábra két görbét a függőleges tengely körül megforgatjuk. Látható,



2.3. ábra. A Rashba-féle Hamilton-operátornak az $s = +1$ (kék görbe) és az $s = -1$ (piros görbe) ágainak megfelelő diszperziós reláció a $k = |\mathbf{k}|$ függvényében egy rögzített \mathbf{k} irány mentén. Itt a k hullámszámot k_{so} , az energiát Δ_{so} egységekben mértük.

hogy a $0 < k < 2k_{\text{so}}$ tartományban az $s = -1$ ág, innentől a *negatív energiás* ág legkisebb értéke $-\Delta_{\text{so}} = -\hbar^2 k_{\text{so}}^2 / (2m^*)$. InAs alapú félvezetőkben $E = 10^7$ V/m elektromos tér mellett $\Delta_{\text{so}} \approx 0,02$ meV = 0,23 K [103], ami meglehetősen kicsi a 50 meV nagyságrendű Fermi-energiához képest.

Hasonlóan könnyen kapjuk a megfelelő sajátfüggvényeket:

$$\psi_{s,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -s i e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \text{ahol} \quad \theta_{\mathbf{k}} = \arctg \frac{k_y}{k_x}. \quad (2.5)$$

Későbbi eredményekkel való összehasonlítás érdekében ismernünk kell a tömbi rendszer állapotsűrűségét. Először számoljuk ki a két ágnak megfelelő $N_{\pm}(E)$ állapotok számát, amelyeknek az energiája kisebb E -nél! Tegyük fel, hogy $E > 0$! Ekkor írhatjuk, hogy

$$N_{\pm}(E) = \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ E_{\pm}(\mathbf{k}) < E}} 1 = \frac{\mathcal{A}}{(2\pi)^2} \int_{E_{\pm}(\mathbf{k}) < E} d^2k = \frac{\mathcal{A}}{(2\pi)^2} \int_0^{k_{\pm}} 2\pi k dk = \frac{\mathcal{A}}{2\pi} \frac{k_{\pm}^2}{2}, \quad (2.6)$$

ahol \mathcal{A} a tömbi kétdimenziós minta területe, és k_{\pm} az $E = E_{\pm}(\mathbf{k})$ egyenletből

számítható ki. A (2.4) egyenletből adódik, hogy

$$|\mathbf{k}| = k_{\pm} = |k \mp k_{\text{so}}|, \quad \text{ahol} \quad k = \sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2} + k_{\text{so}}^2}. \quad (2.7)$$

Ha $E > 0$, akkor az abszolút érték jel elhagyható. Az állapotsűrűség az állapotok számának energia szerinti deriváltja:

$$\varrho_{\pm}(E) = \frac{dN_{\pm}(E)}{dE} = \frac{\mathcal{A}}{2\pi} k_{\pm} \frac{dk_{\pm}}{dE} = \frac{\mathcal{A}}{2\pi} \frac{m^*}{\hbar^2} \frac{k \mp k_{\text{so}}}{k} = \frac{\mathcal{A}}{2\pi} \frac{m^*}{\hbar^2} \left(1 \mp \frac{k_{\text{so}}}{\sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2} + k_{\text{so}}^2}} \right). \quad (2.8)$$

Végül a teljes állapotsűrűség:

$$\varrho(E) = \varrho_+(E) + \varrho_-(E) = \frac{\mathcal{A}}{\pi} \frac{m^*}{\hbar^2}, \quad \text{ha} \quad E > 0. \quad (2.9)$$

Ez a konstans állapotsűrűség megegyezik a kétdimenziós elektrongáz állapotsűrűségével, ha nincs spin-pálya kölcsönhatás, azaz $\alpha = 0$.

Óvatosabban kell eljárunk negatív energiánál, azaz ha $E < 0$. Ekkor csak az $s = -1$ ág van betöltve, a (k_x, k_y) térben egy $k_- = k_{\text{so}} + k$ külső sugarú és egy $k_+ = k_{\text{so}} - k$ belső sugarú gyűrűben vannak betöltött állapotok. Így az $N(E)$ állapotok száma: $N(E) = \frac{\mathcal{A}}{(2\pi)^2} \pi (k_-^2 - k_+^2) = \frac{\mathcal{A}}{\pi} k k_{\text{so}}$. Innen az állapotsűrűség:

$$\varrho(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{\mathcal{A}}{\pi} \frac{m^*}{\hbar^2} \frac{k_{\text{so}}}{k} = \frac{\mathcal{A}}{\pi} \frac{m^*}{\hbar^2} \frac{k_{\text{so}}}{\sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2} + k_{\text{so}}^2}}, \quad \text{ha} \quad E < 0. \quad (2.10)$$

Kiszámíthatjuk a spin várhatóértékét is a (2.5) sajátfüggvényekre vonatkozóan:

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \psi_{s,\mathbf{k}} | \boldsymbol{\sigma} | \psi_{s,\mathbf{k}} \rangle = s \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sin \theta_{\mathbf{k}} \\ -\cos \theta_{\mathbf{k}} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Látható, hogy $\langle \mathbf{S} \rangle$ merőleges a $\mathbf{k} = k(\cos \theta_{\mathbf{k}}, \sin \theta_{\mathbf{k}}, 0)$ hullámszám vektorra mind a két $s = \pm 1$ ág esetében.

2.2. Rashba-biliárdok

A fejezet további részében a [A12, A14] cikkekben közölt eredményeinket foglaljuk össze.

Új, spinnel összefüggő jelenségeket várunk, ha a spin-pálya kölcsönhatás mellett az elektronok mozgását a kétdimenziós gázban tovább korlátozzuk vagy egy szalag szerű tartományba [108–111], vagy gyűrűbe [112, 113], esetleg egy zárt véges részbe, ún. kvantum pöttybe [114–120]. A spin-pálya kölcsönhatás egy zárt rendszer energiaszintjeinek, sajátfüggvényeinek, illetve az árameloszlásának a statisztikáját is befolyásolja [121, 122]. Aleiner és Fal’ko a spin-pálya kölcsönhatás és a külső mágneses tér együttes hatását a véletlenmátrix elmélettel tanulmányozták [123].

Ebben a fejezetben a *Rashba biliárdokat* vizsgáljuk, azaz olyan rendszereket melyekben az elektron ballisztikusan mozog egy kétdimenziós tartományban miközben a dinamikáját a spin-pálya kölcsönhatás is befolyásolja. A rendszer Hamilton-operátorát a (2.2) egyenlettel definiáljuk, úgy hogy a tartomány határán a hullámfüggvényre a Dirichlet-határfeltételt írjuk elő (a hullámfüggvény zérus a határon, lásd például a [117] hivatkozást).

Az α Rashba-féle spin-pálya csatolás erősségét megadhatjuk a spinprecessziós hosszal is, ami $L_{so} = \pi/k_{so}$, és könnyen változtatható a kapufeszültséggel, miközben a rendszer mérete nem változik [105–107]. Ugyanakkor, az α változtatásával a biliárd energiaszintjei külső mágneses tér nélkül is változtathatók.

Célunk a Rashba-biliárdok két fontos jellemzőjét kiszámítani: a $\varrho(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$ állapotsűrűséget (density of states, röviden DOS) és az $N(E) = \sum_n \Theta(E - E_n)$ állapotok számát, ahol E_n a biliárd n -dik energiaszintje (itt $\delta(x)$ és $\Theta(x)$ a Dirac-delta függvény és a Heaviside-függvény vagy másnéven lépcsőfüggvény). Az állapotsűrűséget és az állapotok számát spin-pálya kölcsönhatás nélkül ($\alpha = 0$) korábban már intenzíven kutatták. Az $N(E)$ állapotszámot az ún. Weyl-formula [41] adja meg, ami az egzakt $N(E)$ állapotszám aszimptotikus sora az E energia szerint². A témáról kitűnő bevezető található Baltes és Hilf könyvében [42], és számos alkalmazást talál az olvasó a [43–48] művekben.

Az állapotsűrűséget az egzakt retardált Green-függvényből határozhatjuk meg: (lásd például [49])

$$\varrho(E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im Tr } G(E + i\eta, \mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (2.12)$$

ahol a spúrképzés az $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$ határátmenetet, integrálást \mathbf{r} szerint a biliárd tartományára és a spinváltozók szerinti spúrképzést jelenti. Az egzakt Green-függvény helyreprezentációban $G(z, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \hat{G}(z) | \mathbf{r}' \rangle$, ahol a $\hat{G}(z) = (z - \hat{H})^{-1}$ Green-függvény operátor kielégíti a határfeltételt a biliárd határán. Innen az egzakt állapotok száma: $N(E) = \int_{-\infty}^E \varrho(E') dE'$.

Általában nem ismerjük az egzakt Green-függvényt, ami kielégíti a határfeltételt is. Azonban, az egzakt Green-függvény mindig felírható az ún. *szabad tér Green-függvényének* a sorával, ezért ennek ismerete alapvető a további számolásokban. A szabad tér Green-függvénye nem elégíti ki a határfeltételt. A következő szakaszban kiszámoljuk a $G_\infty(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ szabad tér Green-függvényét Rashba-biliárd esetén, azaz

²Az 1.2 fejezetben kétdimenziós elektrongázra az (1.9) egyenletben már megadtuk a Weyl-formulát E -ben vezető rendben.

a (2.2) egyenlettel adott Hamilton-operátorra. Ezután kör alakú Rashba-biliárdra is meghatározzuk analitikusan az egzakt Green-függvényt, ami teljesíti a Dirichlet-határfeltételt a biliárd határán.

A Weyl-formulában az első tag az ún. *területi tag*, és úgy kapható, hogy az egzakt Green-függvényt lecseréljük a szabad tér Green-függvényével a (2.12) kifejezésben. Ez a tag mindig arányos a biliárd területével, ezért is hívják területi tagnak. A Weyl-formula E -ben magasabb rendű tagjai a területi tag korrekciói, amelyet az egzakt Green-függvény figyelembe vételével kaphatunk. A Weyl-formula második vezető rendű tagját kerületi tagnak nevezik, mert arányos a biliárd kerületével.

Ebben a fejezetben levezetjük az első két vezető tagot a Weyl-formulában tetszőleges alakú Rashba-biliárdra. A módszerünk a Berry és Mondragon által kidolgozott tükrözési módszeren alapul, melyet ők a neutrínó-biliárdra alkalmaztak [124]. A neutrínó-biliárd sajátfüggvényei a Rashba-biliárdhoz hasonlóan kétkomponensűek. Megmutatjuk egyrészt, hogy $N(E)$ vezető tagja valóban arányos a biliárd területével, és megegyezik a tömbi rendszer $N(E)$ állapotszámával, melynek E szerinti deriváltját, az állapotsűrűséget korábban már levezettük (lásd a (2.9) és (2.10) egyenleteket). Másrészt megmutatjuk, hogy a Weyl-formulában, az $N(E)$ -ben a második vezető tag — a fentieknek megfelelően — a biliárd kerületével arányos. Érdekes eredmény továbbá, hogy a biliárd spektrumának az alján az állapotsűrűség szinguláris. Ez az eredmény független a biliárd alakjától, és az α Rashba-csatolás növelésével egyre hangsúlyosabb.

A kör alakú Rashba-biliárd a legegyszerűbb zárt tartomány, ami analitikusan kezelhető [125–127]. A későbbiekben kiszámoljuk az $N(E)$ állapotszámot kör alakú Rashba-biliárdra, és megmutatjuk, hogy a Weyl-formulában az első két vezető tag mellett — amelyek megegyeznek a tetszőleges alakú biliárdra kapott eredménnyel — magasabb rendű korrekciók is megjelennek. Az analitikusan számolt $N(E)$ állapotszámot összevetjük a numerikusan egzaktul számolt energiaszintekből nyert állapotszámmal, és látni fogjuk, hogy az egyezés tökéletes.

A továbbiakban fontos tény — ezért itt ismét hangsúlyozzuk —, hogy a Rashba-biliárdnál, a 2.1 fejezetben látottakhoz hasonlóan (lásd a 2.3 ábrát) az energiaspektrumnak van negatív energiás része is. Megmutatjuk, hogy kör alakú Rashba-biliárdra az állapotsűrűség bizonyos negatív energiaértékeknél szinguláris, és ezek értékeire analitikus kifejezést vezetünk le. Az alább ismertett eredmények [A12, A14] cikkeinkre épülnek.

2.2.1. A szabad tér Green-függvénye Rashba-biliárdokra

A $G_\infty(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ szabad tér Green-függvénye alapvető fontosságú a továbbiakban, ezért ebben a részben a (2.2) egyenlettel definiált Hamilton-operátorral adott Rashba-rendszerre algebrai úton vezetjük le, és megadjuk polárkoordinátákban is az alakját.

Adott E energián két propagáló módus létezik, melyek hullámszámvektorát a (2.4) diszperziós relációból kaphatjuk, és értékeit a (2.7) egyenletben adtuk meg. A Pauli-mátrixok tulajdonságait felhasználva könnyen beláthatjuk, hogy $\hat{U}^2 = p_x^2 + p_y^2$, és a Rashba-rendszer Hamilton-operátora a következő alakba írható:

$$\hat{H} = \frac{\hat{U}^2}{2m^*} + \frac{\alpha}{\hbar} \hat{U}. \quad (2.13)$$

Teljes négyzetté alakítva a fenti operátort a $\hat{G}_\infty(E) = (E - \hat{H})^{-1}$ szabad tér Green-függvénye így írható:

$$\hat{G}_\infty(E) = \frac{2m^*}{\hbar^2} \left[k^2(E) - \left(\frac{\hat{U}}{\hbar} + k_{\text{so}} \right)^2 \right]^{-1}, \quad (2.14)$$

ahol $k(E)$ értéke a (2.7) egyenletben adott. Itt E komplex szám is lehet. Felhasználva a következő operátor-azonosságot:

$$\left(\lambda^2 - \hat{A}^2 \right)^{-1} = \frac{1}{2\lambda} \left[\left(\lambda + \hat{A} \right)^{-1} + \left(\lambda - \hat{A} \right)^{-1} \right], \quad (2.15)$$

ahol λ egy skalár és \hat{A} egy operátor, a $\hat{G}_\infty(E)$ Green-függvény szétszedhető két tagra:

$$\hat{G}_\infty(E) = \frac{m^*}{\tilde{k}\hbar^2} \left[\left(\tilde{k}_- + \frac{\hat{U}}{\hbar} \right)^{-1} + \left(\tilde{k}_+ - \frac{\hat{U}}{\hbar} \right)^{-1} \right], \quad (2.16)$$

ahol $\tilde{k} = \sqrt{2m^*E/\hbar^2 + k_{\text{so}}^2}$ és $\tilde{k}_\pm = \tilde{k} \mp k_{\text{so}}$ ³. Egy újabb

$$\left(\lambda \pm \hat{A} \right)^{-1} = \left(\lambda \mp \hat{A} \right) \left(\lambda^2 - \hat{A}^2 \right)^{-1}$$

operátor-azonosság segítségével azt kapjuk, hogy

$$\hat{G}_\infty(E) = \frac{m^*}{\hbar^2} \frac{1}{\tilde{k}} \left[\left(\tilde{k}_- - \frac{\hat{U}}{\hbar} \right) \left(\tilde{k}_-^2 - \frac{\mathbf{p}^2}{\hbar^2} \right)^{-1} + \left(\tilde{k}_+ + \frac{\hat{U}}{\hbar} \right) \left(\tilde{k}_+^2 - \frac{\mathbf{p}^2}{\hbar^2} \right)^{-1} \right]. \quad (2.17)$$

A retardált szabad tér Green-függvénye helyreprezentációban:

$$G_\infty(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \hat{G}_\infty(E + i\eta) | \mathbf{r}' \rangle, \quad (2.18)$$

ahol E most már valós szám és $\eta \rightarrow 0^+$. A (2.17) egyenletben lévő két tag helyreprezentációban az alábbi két függvény kiszámítását jelenti:

$$\langle \mathbf{r} | \left(\tilde{k}_\pm^2 - \frac{\mathbf{p}^2}{\hbar^2} \right)^{-1} | \mathbf{r}' \rangle. \quad (2.19)$$

Egyszerű határértékszámítással megmutatható, hogy

$$\tilde{k}_+^2(E + i\eta) = k_+^2(E) + \text{sgn}(E) i\eta, \quad (2.20a)$$

$$\tilde{k}_-^2(E + i\eta) = k_-^2(E) + i\eta, \quad (2.20b)$$

ahol k_\pm hullámszámvektorokat a (2.7) egyenlet szerint definiáltuk. A (2.19) egyenletben

³A \tilde{k} abban különbözik k -tól, hogy az előbbiben E komplex szám is lehet.

lévő két függvény a következő azonosság alapján számolható ki (lásd pl. [49]):

$$\langle \mathbf{r} | \left(k^2 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{\hbar^2} \pm i\eta \right)^{-1} | \mathbf{r}' \rangle = \begin{cases} -\frac{i}{4} H_0^{(1)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \\ \frac{i}{4} H_0^{(2)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \end{cases} \quad (2.21)$$

ahol $H_0^{(1,2)}(x)$ a zérusrendű Hankel-függvény és $k > 0$, az egyenlet jobb oldalán a felső (alsó) sor az egyenlet baloldalán szereplő $+$ ($-$) előjeleknek felelnek meg. Végül felhasználva a (2.17) - (2.21) egyenleteket könnyen kapjuk, hogy $E \geq 0$ -ra

$$G_\infty(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = c \left[\left(k_- - \frac{\hat{U}}{\hbar} \right) H_0^{(1)}(k_-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) + \left(k_+ + \frac{\hat{U}}{\hbar} \right) H_0^{(1)}(k_+|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \right], \quad (2.22a)$$

és $E < 0$ -ra

$$G_\infty(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = c \left[\left(k_- - \frac{\hat{U}}{\hbar} \right) H_0^{(1)}(k_-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) - \left(-k_+ + \frac{\hat{U}}{\hbar} \right) H_0^{(2)}(k_+|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \right], \quad (2.22b)$$

$$\text{ahol } c = -\frac{im^*}{4\hbar^2 k}. \quad (2.22c)$$

Megjegyezzük, hogy negatív E energiákra a retardált szabad tér Green-függvény a $H_0^{(1)}$ függvény mellett tartalmaz $H_0^{(2)}$ függvényt is, amely aszimptotikusan, azaz nagy távolságokra egy befutó hengerhullámként viselkedik.

A későbbiek miatt kiszámítjuk a $G_\infty(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ Green-függvény alakját polárkoordinátákban is. A (2.2) Hamilton-operátor az $\mathbf{r} = (r, \varphi)$ polárkoordinátákban

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{\alpha}{\hbar} \hat{U}, \quad \text{ahol } \hat{H}_0 = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right), \quad (2.23a)$$

$$\text{és } \frac{\hat{U}}{\hbar} = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ -e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.23b)$$

Így a (2.22) és (2.23b) egyenleteket felhasználva a szabad tér Green-függvénye:

$$G_\infty(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = c \begin{cases} \begin{bmatrix} k_- H_-^1 + k_+ H_+^1 & -e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) (H_-^1 - H_+^1) \\ e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) (H_-^1 - H_+^1) & k_- H_-^1 + k_+ H_+^1 \end{bmatrix}, \\ \begin{bmatrix} k_- H_-^1 + k_+ H_+^2 & -e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) (H_-^1 + H_+^2) \\ e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) (H_-^1 + H_+^1) & k_- H_-^1 + k_+ H_+^2 \end{bmatrix}, \end{cases} \quad (2.24)$$

ahol a felső sor a $E > 0$, míg az alsó sor a $-\Delta_{\text{so}} < E < 0$ energiákra érvényes, és bevezettük a $H_\pm^{1,2} \equiv H_0^{(1,2)}(k_\pm|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ jelöléseket. A nemdiagonális elemekben az r és φ szerinti deriváltakat elvégezhetjük a $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ új változó bevezetésével. Így könnyen látható, hogy $E > 0$ -re a fenti algebrai módszerrel levezetett Green-függvény

megegyezik Walls és munkatársainak más úton kapott eredményével [128]. Azonban, ők negatív E energiákra nem számolták ki a Green-függvényt.

A (2.2) Hamilton-operátor (2.5) sajátfüggvényeit is kiszámíthatjuk polárkoordinátákban, és így a fenti Green-függvényt még kompaktabb alakban írhatjuk fel. Mivel a \hat{H} Hamilton-operátor kommutál a $\hat{J}_z = -i\hbar\partial_\varphi + \frac{\hbar}{2}\sigma_z$ teljes impulzusmomentum-operátorral a $\hat{H}|\chi\rangle = E|\chi\rangle$ Schrödinger-egyenlet megoldását a következő formában kereshetjük [117, 118]:

$$\langle \mathbf{r} | \chi_m \rangle = \begin{pmatrix} C_1 Z_m(kr) e^{im\varphi} \\ C_2 Z_{m+1}(kr) e^{i(m+1)\varphi} \end{pmatrix}, \quad (2.25)$$

ahol m egész szám, $k > 0$, míg $Z_m(x)$ a $J_m(x)$, $Y_m(x)$ és $H_m^{(1,2)}(x)$ Bessel-függvények valamelyike. A diszperziós reláció két ágának ($s = \pm 1$ a (2.4) egyenletben) megfelelő C_1^\pm és C_2^\pm együtthatók könnyen kaphatók a fenti anatznak a Schrödinger-egyenletbe való helyettesítésével, illetve a

$$Z'_m(x) \pm \frac{m}{x} Z_m(x) = \pm Z_{m\mp 1}(x), \quad (2.26)$$

jól ismert Bessel-függvényekre érvényes rekurziós relációk segítségével [50], és a következőt kapjuk:

$$\begin{aligned} C_1^\pm / C_2^\pm &= \pm 1, \quad \text{ha } E > 0, \\ C_1^\pm / C_2^\pm &= -1, \quad \text{ha } -\Delta_{\text{so}} < E < 0. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Végül az origóban reguláris sajátfüggvények polárkoordinátákban:

$$\langle \mathbf{r} | \chi_m^\pm \rangle = \begin{cases} \begin{pmatrix} \pm J_m(k_\pm r) \\ J_{m+1}(k_\pm r) e^{i\varphi} \end{pmatrix} e^{im\varphi}, & E > 0, \\ \begin{pmatrix} -J_m(k_\pm r) \\ J_{m+1}(k_\pm r) e^{i\varphi} \end{pmatrix} e^{im\varphi}, & E < 0, \end{cases} \quad (2.28)$$

ahol E -re a (2.4) diszperziós reláció két megoldása k_\pm , melyeket a (2.7) egyenletben definiáltunk.

A szabad tér Green-függvényének a sajátfüggvényekkel kifejezett alakjához szükség van az origóban szinguláris sajátfüggvényekre is:

$$\langle \mathbf{r} | h_m^\pm \rangle = \begin{pmatrix} \pm H_m^{(1)}(k_\pm r) \\ H_{m+1}^{(1)}(k_\pm r) e^{i\varphi} \end{pmatrix} e^{im\varphi}, \quad E > 0, \quad (2.29a)$$

$$\langle \mathbf{r} | h_m^+ \rangle = \begin{pmatrix} -H_m^{(2)}(k_+ r) \\ H_{m+1}^{(2)}(k_+ r) e^{i\varphi} \end{pmatrix} e^{im\varphi}, \quad E < 0, \quad (2.29b)$$

$$\langle \mathbf{r} | h_m^- \rangle = \begin{pmatrix} -H_m^{(1)}(k_- r) \\ H_{m+1}^{(1)}(k_- r) e^{i\varphi} \end{pmatrix} e^{im\varphi}, \quad E < 0. \quad (2.29c)$$

Ezután felírhatjuk a szabad tér Green-függvényét a fenti sajátfüggvényekkel, amelyek — mint látni fogjuk — hasznos lesz a kör alakú Rashba-biliárdok állapotsűrűségének meghatározásához. Ennek érdekében a (2.24) Green-függvény nemdiagonális elemeiben szereplő r és φ szerinti deriválásokat a következő addíciós összefüggéssel [50]

$$H_0^{(1,2)}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} H_m^{(1,2)}(r) J_m(r') e^{im(\varphi - \varphi')}, \quad r > r',$$

és a (2.26) rekurziós relációkat felhasználva végezhetjük el. Végül viszonylag egyszerűen belátható, hogy a (2.24) szabad tér Green-függvény Rashba-biliárdokra a (2.28)–(2.29) hullámfüggvényekkel a következő kompakt alakba írható:

$$G_{\infty}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = c \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[k_+ \langle \mathbf{r} | h_m^+ \rangle \langle \chi_m^+ | \mathbf{r}' \rangle + k_- \langle \mathbf{r} | h_m^- \rangle \langle \chi_m^- | \mathbf{r}' \rangle \right], \quad (2.30)$$

ahol a c paramétert a (2.22c) egyenletben adtuk meg. Ez az eredmény minden energiára érvényes. A Green-függvénynek ezt az alakját fogjuk majd használni a 2.2.3 fejezetben.

2.2.2. A Weyl-formula területi és kerületi tagja tetszőleges alakú Rashba-biliárdra

Ebben a fejezetben kiszámoljuk az állapotsűrűség Weyl-formulájának [41, 42, 49] E szerinti első két vezető rendű tagját (a területi és kerületi tagot) tetszőleges alakú Rashba-biliárdra.

Először tekintsük a területi tagot! Az állapotsűrűség (2.12) kifejezésében az egzakt Green-függvényt lecseréljük a (2.22) szabad tér Green-függvényére. Az \hat{U} operátor spinváltozók szerinti spúrja zérus, ezért ezek a tagok nem adnak járulékot. Könnyen látható, hogy emiatt az állapotsűrűség vezető rendű tagja:

$$\varrho_{\text{area}}(E) = \frac{\mathcal{A}}{2\pi} \frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{1}{k} \begin{cases} k, & \text{ha } E > 0, \\ k_{\text{so}}, & \text{ha } E < 0, \end{cases} \quad (2.31)$$

ahol \mathcal{A} a Rashba-biliárd területe, és k a (2.7) egyenletben van adva. A levezetésből világos, hogy a Weyl-formula vezető rendű tagja, a területi tag mindig arányos a biliárd területével. Az állapotok száma az állapotsűrűség E szerinti integrálja:

$$N_{\text{area}}(E) = \frac{\mathcal{A}}{\pi} \frac{2m^*}{\hbar^2} \begin{cases} \frac{E}{2} + \Delta_{\text{so}}, & \text{ha } E > 0, \\ \sqrt{\Delta_{\text{so}}} \sqrt{E + \Delta_{\text{so}}}, & \text{ha } -\Delta_{\text{so}} < E < 0. \end{cases} \quad (2.32)$$

A (2.31) egyenletből látható, hogy negatív energiákra az állapotsűrűség $1/\sqrt{E + \Delta_{\text{so}}}$ négyzetgyökös szingularitást mutat a biliárd energiaspektrumának alján, azaz $E \rightarrow -\Delta_{\text{so}}$ energiánál. A bevezető részben, a (2.9) és a (2.10) egyenletekben ugyanezt az eredményt kaptuk. Ez általánosan, minden biliárdra így van.

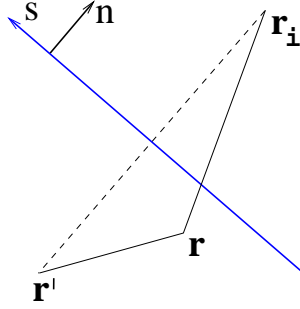
Most kiszámoljuk a Weyl-formulában a kerületi tagot tetszőleges alakú Rashba-biliárdra. Ezt a tagot tükrözési módszer [44] általánosításával, csak a szabad tér Green-függvényének felhasználásával vezetjük le. A konkrét számolás sokban hasonlít Berry

és Mondragon neutrínó-biliárdokra végzett számolásaikhoz [124]. A biliárd határát egyenes szakasszal közelítjük, és az egzakt Green-függvénynek a

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \approx G_\infty(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \text{ ahol} \quad (2.33a)$$

$$G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv -G_\infty(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i), \quad (2.33b)$$

közelítő alakját használjuk. Itt \mathbf{r}_i az \mathbf{r}' tükörképe a biliárd határára (lásd a 2.4 ábrát). Nyilvánvaló, hogy $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ is kielégíti a Schrödinger-egyenletet az \mathbf{r} változójában.



2.4. ábra. Az \mathbf{r}_i pont az \mathbf{r}' tükörképe a biliárd egy kis szakaszának egyenessel közelített határára (kék vonal). Az \mathbf{r} és \mathbf{r}' helyvektorok a biliárd belsejében vannak.

A (2.12) kifejezésben a spúr kiszámításához definiáljuk az $\mathbf{r} = (n, s)$ és $\mathbf{r}' = (n, s + \sigma)$ helyvektorokat, ahol n és s az \mathbf{r} koordinátái a biliárd határára merőleges irányban és a határ mentén. Természetesen $n < 0$, hiszen \mathbf{r} a biliárd belsejében van. A $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$ határátközü a spúrképzésben a $\sigma \rightarrow 0$ határátközünek felel meg. Ekkor $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i| = \sqrt{(2n)^2 + \sigma^2}$, és a $G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ -ből származó korrekció a $\varrho(E)$ állapotsűrűségben így írható:

$$\begin{aligned} \varrho_{\text{perim}}(E) &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im Tr } \hat{G}_i(E + i\eta, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ &= -\frac{1}{2\pi} \frac{m^*}{\hbar^2} \frac{1}{k} \int_0^{\mathcal{L}} ds \int_{-\infty}^0 dn [k_- J_0(k_- 2n) + k_+ J_0(k_+ 2n)], \end{aligned} \quad (2.34)$$

ahol az s szerinti integrálban \mathcal{L} a biliárd kerülete, és a spinváltozók szerinti spúrból adódó 2-es faktor már be van számítva. Felhasználva az $\int_0^\infty J_0(ax) dx = 1/a$ összefüggést (itt $a > 0$) kapjuk, hogy

$$\varrho_{\text{perim}}(E) = -\frac{\mathcal{L}}{4\pi} \frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{1}{k}, \quad (2.35)$$

ami minden $E > -\Delta_{\text{so}}$ energiára érvényes. Végül az állapotsűrűség E szerinti integrálja adja az állapotok számát:

$$N_{\text{perim}}(E) = -\frac{\mathcal{L}}{2\pi} \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}} \sqrt{E + \Delta_{\text{so}}}, \quad (2.36)$$

ami ugyancsak minden $E > -\Delta_{\text{so}}$ energiára érvényes. A minusz előjel a Dirichlet-határfeltétel következménye.

Összefoglalva, az első két vezető tag a Weyl-formulában $N(E) = N_{\text{area}}(E) +$

$N_{\text{perim}}(E)$. Megjegyezzük, hogy a spin-pálya csatolás hiányában ($\alpha = 0$) az $N(E)$ állapotok száma megegyezik a korábbi eredménnyel, melyet kétdimenziós elektrongázra vezettek le [42, 43, 45, 47, 49] (eltekintve a spinből származó 2-es faktortól).

2.2.3. Kör alakú Rashba-biliárd egzakt Green-függvénye

Ebben a részben az R sugarú kör alakú Rashba-biliárdot vizsgáljuk. A rendszer sajátfüggvényeit felírhatjuk az origóban reguláris (2.28) sajátfüggvények lineáris kombinációjaként. A függvényben szereplő együtthatókat a Dirichlet-határfeltételből számíthatjuk ki. Egyszerű számolásból kapjuk a szekuláris egyenletet:

$$J_m(k_+R)J_{m+1}(k_-R) + \text{sgn}(E)J_m(k_-R)J_{m+1}(k_+R) = 0, \quad (2.37)$$

ahol m egy egész szám. Minden rögzített m kvantumszámra ennek az egyenletnek a megoldásai adják a kör alakú Rashba-biliárd energiaszintjeit. Ugyanezt a szekuláris egyenletet vezették le a [125–127] cikkekben is. Ez az egyenlet invariáns az $m \rightarrow -m-1$ cserére; ezt nevezik Kramers-degenerációnak. A triviális megoldás, amikor k_+ vagy k_- zérus, kizárható, mert ekkor a hullámfüggvény zérus a biliárd minden pontjában. Ilyen megoldás például az $E = -\Delta_{\text{so}}$.

Az állapotsűrűség kiszámításához szükség van a kör alakú Rashba-biliárd egzakt Green-függvényére. A Dirichlet-határfeltétel miatt ez a Green-függvény zérus a biliárd határán, azaz amikor vagy az \mathbf{r} vagy \mathbf{r}' a határon van. A (2.30) szabad tér Green-függvénye általában nem teljesíti ezt a Dirichlet-határfeltételt, de egy alkalmasan választott \hat{G}_H homogén Green-függvény hozzáadásával már teljesül. Itt \hat{G}_H kielégíti a $(E - \hat{H}) \hat{G}_H = 0$ homogén egyenletet. A határfeltétel \hat{G} -re:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_\infty(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + G_H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0, \quad \text{for } |\mathbf{r}| = R, \quad (2.38)$$

ahol \mathbf{r}' a biliárd belsejében van. Mivel a \hat{G}_H homogén Green-függvény is teljesíti a Schrödinger-egyenletet, ezért felépíthető a (2.28) reguláris sajátfüggvényekből:

$$\hat{G}_H = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[A_m |\chi_m^+\rangle \langle \chi_m^+| + B_m |\chi_m^-\rangle \langle \chi_m^+| + C_m |\chi_m^+\rangle \langle \chi_m^-| + D_m |\chi_m^-\rangle \langle \chi_m^-| \right], \quad (2.39)$$

ahol az A_m, B_m, C_m , és D_m együtthatók a (2.38) határfeltételből kaphatók. Tetszőleges alakú biliárdra ez végtelen sok együttható meghatározását jelenti, de szerencsére kör alakú biliárdra ezek az együtthatók véges számúak és analitikusan kiszámíthatók. Ha a (2.30) és (2.39) egyenleteket behelyettesítjük a (2.38) egyenletbe, akkor a $\langle \chi_m^\pm | \mathbf{r}' \rangle$ sajátfüggvények együtthatóinak azonosításával a következőt kapjuk:

$$A_m \langle \mathbf{r} | \chi_m^+ \rangle + B_m \langle \mathbf{r} | \chi_m^- \rangle = -c k_+ \langle \mathbf{r} | h_m^+ \rangle, \quad (2.40a)$$

$$C_m \langle \mathbf{r} | \chi_m^+ \rangle + D_m \langle \mathbf{r} | \chi_m^- \rangle = -c k_- \langle \mathbf{r} | h_m^- \rangle, \quad (2.40b)$$

ahol az $\langle \mathbf{r} | \chi_m^\pm \rangle$ sajátfüggvényeket az $|\mathbf{r}| = R$ helyen kell venni. Ez a két egyenlet valójában négy inhomogén lineáris egyenlet az A_m, B_m, C_m , és D_m együtthatókra, és

így analitikusan meghatározhatók a (2.40) egyenletekből:

$$A_m = -\frac{ck_+}{F_m} \begin{cases} \begin{vmatrix} H_m^{(1)}(k_+R) & -J_m(k_-R) \\ H_{m+1}^{(1)}(k_+R) & J_{m+1}(k_-R) \end{vmatrix}, \\ \begin{vmatrix} -H_m^{(2)}(k_+R) & -J_m(k_-R) \\ H_{m+1}^{(2)}(k_+R) & J_{m+1}(k_-R) \end{vmatrix}, \end{cases} \quad (2.41a)$$

$$D_m = -\frac{ck_-}{F_m} \begin{cases} \begin{vmatrix} J_m(k_+R) & -H_m^{(1)}(k_-R) \\ J_{m+1}(k_+R) & H_{m+1}^{(1)}(k_-R) \end{vmatrix}, \\ \begin{vmatrix} -J_m(k_+R) & -H_m^{(1)}(k_-R) \\ J_{m+1}(k_+R) & H_{m+1}^{(1)}(k_-R) \end{vmatrix}, \end{cases} \quad (2.41b)$$

$$B_m = C_m = \frac{2ic}{\pi R F_m}, \quad \text{és} \quad (2.41c)$$

$$F_m = J_m(k_+R)J_{m+1}(k_-R) + \text{sgn}(E)J_m(k_-R)J_{m+1}(k_+R). \quad (2.41d)$$

Az A_m és D_m kifejezésekben a felső sor az $E > 0$, míg az alsó sor a $-\Delta_{s0} < E < 0$ energiákra érvényes. A (2.41c) egyenletben kihasználtuk a Bessel-függvényekre érvényes Wronski-relációkat [50].

Végül az egzakt Green-függvény helyreprezentációjában $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_\infty(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + G_H(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, ahol $G_\infty(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ a (2.24) vagy a (2.30) egyenlettel adott, míg a homogén Green-függvény helyreprezentációjában $G_H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \hat{G}_H | \mathbf{r}' \rangle$, és a \hat{G}_H operátor a (2.39) egyenletből a (2.28) és a (2.41) egyenletek felhasználásával számolható ki.

Bármely biliárd energiaszintjei megegyeznek a retardált Green-függvény pólusaival. Kör alakú Rashba-biliárd \hat{G} egzakt Green-függvényének pólusai a \hat{G}_H pólusai, hiszen a \hat{G}_∞ szabad tér Green-függvénynek nincsenek pólusai. Könnyen látható, hogy \hat{G}_H pólusai az F_m zérushelyei, melyek valóban a (2.37) szekuláris egyenlet zérushelyei. Ez az eredmény egyben ellenőrzési lehetőség, hogy \hat{G}_H alakja a pólusokat tekintve helyes.

2.2.4. A Weyl-formula korrekciója kör alakú Rashba-biliárdra

A továbbiakban kiszámítjuk az állapotsűrűség és az állapotok számának első néhány vezető rendű tagját kör alakú Rashba-biliárdra Berry és Howls [47] szisztematikus sorfejtési módszerével, melyet ők egy R sugarú tartományba zárt kétdimenziós elektrongázra alkalmaztak.

Az egzakt $\hat{G} = \hat{G}_\infty + \hat{G}_H$ Green-függvény első tagja adja a (2.12) állapotsűrűség területi tagját, és az eredmény a (2.31) kifejezés. Míg az állapotok száma a (2.32) kifejezésből kapható. Az állapotsűrűség korrekciós tagjait \hat{G}_H homogén Green-függvény

spúrja adja. Viszonylag egyszerű számolás után a következőt kapjuk:

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{G}_H = & 2\pi \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^R r dr \left[J_m^2(k_+ r)(A_{m-1} + A_m) + J_m^2(k_- r)(D_{m-1} + D_m) \right. \\ & \left. + 2J_m(k_+ r)J_m(k_- r) \begin{cases} (B_{m-1} - B_m), & E > 0 \\ (B_{m-1} + B_m), & E < 0 \end{cases} \right]. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Az A_{m-1} tagokat tartalmazó sorban az m összegzési indexet eltoltuk egyel, hogy ugyanazt a radiális integrált kapjuk, mint az A_m tagokat tartalmazó sorban, és hasonlóan jártunk el a B_{m-1}, C_{m-1} és D_{m-1} tagokat tartalmazó sorokban is. A radiális integrál egzaktul elvégezhető [129]. Az állapotsűrűséghez ki kell számolni a $\text{Tr } \hat{G}_H$ kifejezést az $E + i\eta$ komplex energián. Ennek érdekében hasznos Stewartson és Waechter [45], és később például Berry és Howls [47] eljárásához hasonlóan, a $J_m(z)$ és $H_0^{(1,2)}(z)$ Bessel-függvényeket átírni az $I_m(z)$ és $K_m(z)$ módosított Bessel-függvényekre az E energiának a komplex síkra való kiterjesztésével (az angolul heat-kernel method). A következő lépés, hogy $\text{Tr } \hat{G}_H$ -ben a módosított Bessel-függvényeket kicseréljük azok *uniform-közelítéssel* adott — a változó minden értékénél gyorsan konvergáló — sorraival [47, 50]. Ezután megtartva a vezető rendű tagokat, hosszabb számolással⁴ a következőt kapjuk:

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{G}_H = & \frac{m^* R^2}{h^2 x} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{x_+}{m^2 + x_+^2} + \frac{x_-}{m^2 + x_-^2} \right] \right. \\ & \left. + \frac{1}{x_+ + x_-} \left[1 - \frac{2m^2 + x_+^2 + x_-^2}{2\sqrt{(m^2 + x_+^2)(m^2 + x_-^2)}} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.43a)$$

ahol

$$ix \equiv Rk(E + i\eta), \quad (2.43b)$$

$$ix_+ \equiv \text{sgn}(E)Rk_+(E + i\eta), \quad (2.43c)$$

$$ix_- \equiv Rk_-(E + i\eta). \quad (2.43d)$$

Megjegyezzük, hogy a (2.43a) kifejezés második tagjának szögletes zárójelében lévő rész zérus, ha $x_+ \rightarrow x_-$, azaz amikor nincs spin-pálya kölcsönhatás ($\alpha = 0$), és ekkor a kétdimenziós elektrongáz kerületi tagját kapjuk a Weyl-formulában. További korrekciós tagokat úgy kaphatunk szisztematikus módon, hogy a módosított Bessel-függvények uniform-közelítésében a sor további tagjait is figyelembe vesszük [47]. Azonban véges spin-pálya kölcsönhatás esetén a számolás egyre bonyolultabbá válik.

A (2.43a) kifejezésben az m szerinti összegzés a

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f_m = \sum_{\mu=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dmf_m e^{i2\pi\mu m} \quad (2.44)$$

Poisson-féle összegzési formula [49, 130] segítségével átírható. Ezután — követve Berry

⁴További részletek találhatók az [A14] cikkünkben.

és Howls eljárását [47] — csak a $\mu = 0$ tagot tartjuk meg⁵. Végül az $\eta \rightarrow 0$ határátmenet és az m szerinti integrál elvégzése után, $\text{Tr } \hat{G}_H$ -ból az állapotsűrűség korrekciójára egy meglehetősen hosszadalmas számolással a következő eredményt kapjuk:

$$\bar{\varrho}_H(\varepsilon) = -\frac{1}{2\sqrt{\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}}} - \sqrt{\varepsilon_{\text{so}}} \delta(\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}) - \frac{1}{\pi} \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}}} \left[E\left(\sqrt{\frac{\varepsilon_{\text{so}}}{\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}}}\right) - K\left(\sqrt{\frac{\varepsilon_{\text{so}}}{\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}}}\right) \right], & \varepsilon > 0, \\ \frac{\sqrt{\varepsilon_{\text{so}}}}{\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}} \left[E\left(\sqrt{\frac{\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}}{\varepsilon_{\text{so}}}}\right) - K\left(\sqrt{\frac{\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}}{\varepsilon_{\text{so}}}}\right) \right], & \varepsilon < 0, \end{cases} \quad (2.45)$$

ahol bevezettük az $\varepsilon = 2m^*ER^2/\hbar^2$ és az $\varepsilon_{\text{so}} = 2m^*\Delta_{\text{so}}R^2/\hbar^2 = k_{\text{so}}^2R^2$ dimenziótlan paramétereket. Itt $E(x)$ és $K(x)$ a teljes elliptikus integrálok a [129] könyvbeni definíció szerint. A felülvonás $\bar{\varrho}_H(\varepsilon)$ -ban arra utal, hogy az oszcilláló tagokat elhagytuk, ez az állapotsűrűség ún. sima része. Az első tag $\bar{\varrho}_H(\varepsilon)$ -ban (2.43a) első két tagjából jön, és megegyezik a tetszőleges alakú Rashba-biliárd (2.35) kerületi tagjával. A Dirac-delta tag és az elliptikus integrálokat tartalmazó tagok (2.43a) második szögletes zárójeles tagjából származnak, és ezek a kerületi tag korrekciós tagjai kör alakú Rashba-biliárdra.

Végül az állapotsűrűség E szerinti integrálja adja az állapotok számának sima részét Rashba-biliárdra:

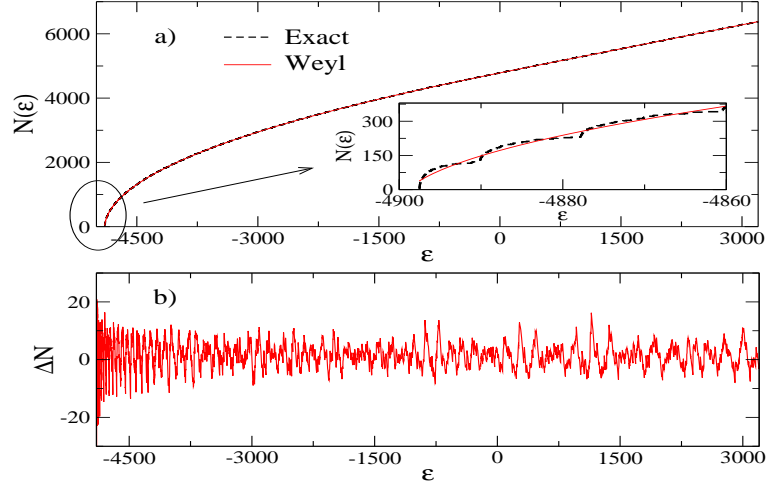
$$\bar{N}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{\varepsilon + 2\varepsilon_{\text{so}}}{2} - \sqrt{\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}} + \frac{2}{\pi} \left[\frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}}} K\left(\sqrt{\frac{\varepsilon_{\text{so}}}{\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}}}\right) - \sqrt{\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}} E\left(\sqrt{\frac{\varepsilon_{\text{so}}}{\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}}}\right) \right], & \text{ha } \varepsilon > 0, \\ \sqrt{\varepsilon_{\text{so}}}\sqrt{\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}} - \sqrt{\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}} - \frac{2\sqrt{\varepsilon_{\text{so}}}}{\pi} E\left(\sqrt{\frac{\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}}{\varepsilon_{\text{so}}}}\right), & \text{ha } -\varepsilon_{\text{so}} < \varepsilon < 0. \end{cases} \quad (2.46)$$

Az első két tag (mind pozitív, mind negatív energiára) a \hat{G}_∞ szabad tér Green-függvényéből jön, ezek a területi és kerületi tagok a Weyl-formulában, és megegyeznek a korábban tetszőleges alakú Rashba-biliárdra levezetett (2.32) és (2.36) eredményekkel. Az elliptikus integrálokat tartalmazó tagok a kerületi tag korrekciós tagjai kör alakú Rashba-biliárdra. Megjegyezzük, hogy egy teljesen eltérő, optikai rendszerben, a kör alakú változó törésmutatójú biliárdban ugyancsak fellépnek teljes elliptikus integrálok [131].

A fenti (2.46) eredményt, az $\bar{N}(\varepsilon)$ állapotok számának sima részét összehasonlítottuk a (2.37) szekuláris egyenletből kapott $N(\varepsilon)$ egzakt állapotok számával kör alakú Rashba-biliárdra. Mint látjuk az egyetlen dimenziótlan paraméter a $k_{\text{so}}R$ mennyiség. Az $L_{\text{so}} = \pi/k_{\text{so}}$ spinprecessziós hossz tipikus értéke akár néhány száz nanométer nagyságú is lehet [94]. Ha $R = 10 \mu\text{m}$ sugarú kvantumgyűrűt veszünk, akkor Rashba-biliárdra a releváns paraméter elérheti a $k_{\text{so}}R = 70$ értéket is (például 10^7 V/m elektromos térerősség mellett GaAs, GaSb, InAs and InSb félvezetőkre $k_{\text{so}}R$ értéke 3,8, 17,8, 34,5 és 89,2 [103]).

A 2.5 a ábra mutatja az egzakt és az állapotok számának sima részét a dimenziótlan ε függvényében. Az ábrán 6388 energiaszintet vettünk számításba. A 2.5 b ábrán látható a két függvény $\Delta N = N(\varepsilon) - \bar{N}(\varepsilon)$ különbsége ε függvényében. Látható,

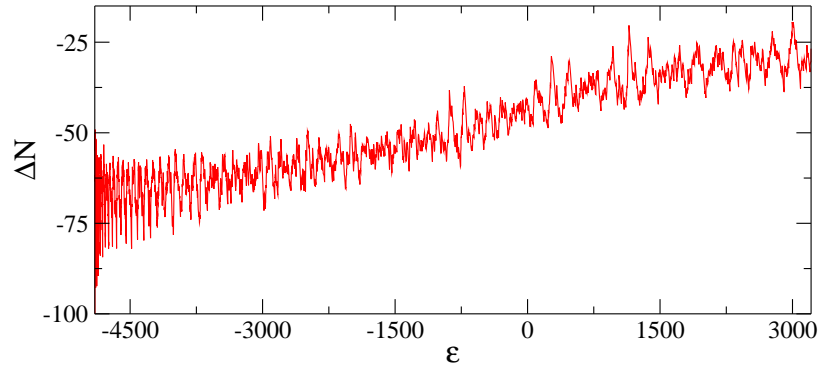
⁵A $\mu \neq 0$ tagok az állapotsűrűség oszcilláló tagjait eredményezik a Weyl-formulában.



2.5. ábra. a) Az egzakt $N(E)$ állapotok száma (szaggatott vonal) és $\bar{N}(E)$, az állapotok számának sima része (piros, folytonos vonal) az E energia ($\varepsilon = 2m^*ER^2/\hbar^2$ egységekben) függvényében. Az ábrabetét az a) ábra kinagyított része a spektrum alján. b) $\Delta N = N(\varepsilon) - \bar{N}(\varepsilon)$ különbség ε függvényében. Mindkét ábránál a $\sqrt{\varepsilon_{s0}} = k_{s0}R = 70$ értékkel számoltunk.

hogy az egyezés kitűnő, és a ΔN különbség zérus körül fluktuál, ahogy ezt a helyes Weyl-formulától várjuk. Ez azt jelenti, hogy a szekuláris egyenlet megoldásakor nem vettünk gyököt, azaz energiaszintet⁶.

Érdeemes megnézni, hogy a (2.46) kifejezésben az elliptikus integrálokat tartalmazó korrekciós tagok nélkül a $\Delta N = N(\varepsilon) - \bar{N}(\varepsilon)$ különbség hogyan változik az energia függvényében. A 2.6 ábra mutatja, hogy ΔN monoton nő az energia függvényében, és a növekedés kb. 27 az ábrázolt energia-tartományban. Ezért az állapotsűrűségben,



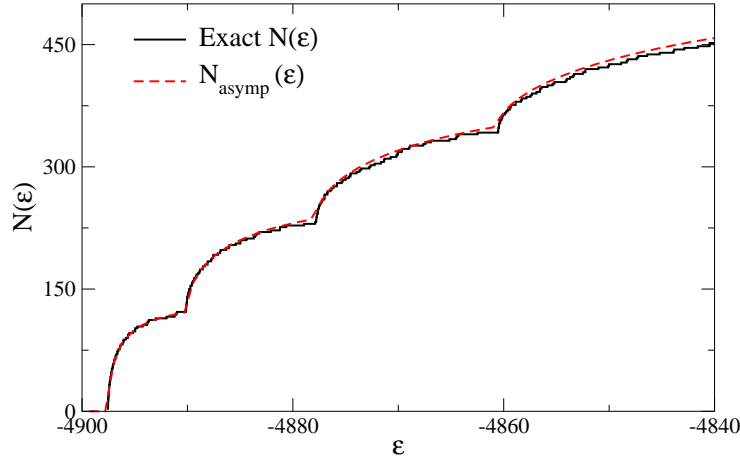
2.6. ábra. A ΔN különbség a (2.46) kifejezésben az elliptikus integrálokat tartalmazó tagok nélkül az E energia ($\varepsilon = 2m^*ER^2/\hbar^2$ egységekben) függvényében. Itt is $k_{s0}R = 70$.

illetve az állapotok számában a korrekciós tagok nélkül nem kapjuk meg a helyes Weyl-formulát.

⁶ ΔN egy általánosan használt módszer a hiányzó gyökök keresésére, hiszen ha valamelyik gyök hiányzik, akkor ettől a gyöktől számítva ΔN már nem zérus körül fog fluktuálni, lásd pl. [132].

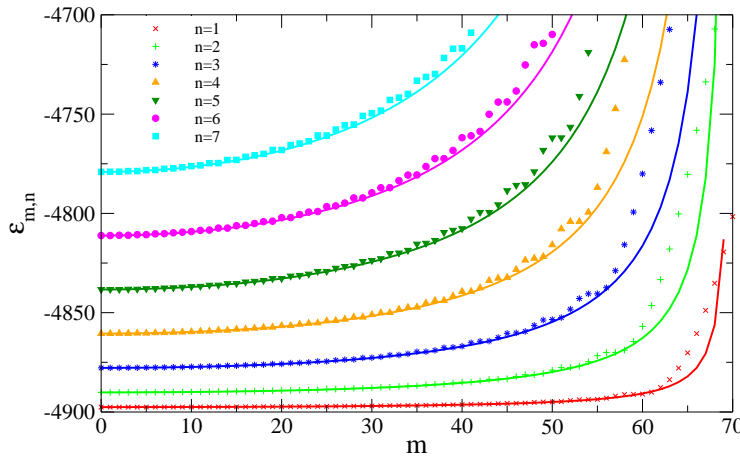
Az állapotok száma negatív energiákra

Érdekes viselkedést mutat az állapotok száma kör alakú Rashba-biliárdra negatív energiákon. A 2.7 ábrán az egzakt $N(E)$ állapotok száma bizonyos ε_n^* energiákon (ezeket később határozzuk meg, lásd a (2.50b) összefüggést) lépcsőszerűen ugrik, de az egyes lépcsők erősen lekerekítettek. Ez a lépcsős viselkedés ΔN -ben nagy változásokat jelent az ε_n^* energiákon, és így, itt nagy csúcsok jelennek meg az állapotsűrűségben.



2.7. ábra. Az egzakt $N(E)$ állapotok száma (folytonos vonal) és a később levezetett (2.50) aszimptotikus $N_{\text{asymp}}(E)$ állapotok száma (piros, szaggatott vonal) negatív energiákra ($\varepsilon = 2m^*ER^2/\hbar^2$ egységekben). Itt is $k_{\text{so}}R = 70$.

Ennek a furcsa viselkedésnek a megértéséhez hasznos ábrázolni az egyes energiaszinteket m függvényében, ahogy ez a 2.8 ábrán látható. Az egyes görbék majdnem



2.8. ábra. Az egzakt energiaszinteknek ($\varepsilon = 2m^*ER^2/\hbar^2$ egységekben) az m kvantumszámtól való függése kör alakú Rashba-biliárdra (különböző szimbólumok) adott n -re, mely $n = 1$ és $n = 7$ között változik. A folytonos vonal az egzakt energiaszintek közelítése a (2.47) egyenlet alapján (lásd a szöveget). Itt is $k_{\text{so}}R = 70$.

vízszintesek az ε_n^* ($n = 1, 2, \dots$) energiákon, és így ezeken az energiákon az állapotsűrűségben nagy csúcsok jelennek meg. A Bessel-függvények nagy argumentumra

érvényes Debye-féle aszimptotikus kifejezését használva [50] a (2.37) szekuláris egyenletből levezethetjük az energiszinteknek az m és n kvantumszámoktól való közelítő függését, és a következőt kapjuk negatív energiákra:

$$\varepsilon_{m,n} = \varepsilon_{\text{so}} \left[\frac{(\frac{n\pi}{2})^2}{\varepsilon_{\text{so}} - m^2} - 1 \right], \quad \text{ha } \varepsilon_{m,n} < 0. \quad (2.47)$$

A 2.8 ábrából az is jól látszik, hogy az egzakt energiszinteknek az m és n kvantumszámoktól való függése jól egyezik a (2.47) közelítő eredménnyel. Kis m, n -re az egyezés szinte tökéletes, például $\varepsilon_{0,1}$ 7 tizedesjegyre megegyezik az egzakt értékkel $\varepsilon_{\text{so}} = k_{\text{so}}R = 70$ paraméter mellett. Kör alakú Rashba-biliárd energia-spektrumának legkisebb értéke $E_{\text{min}} = \hbar^2/(2m^*R^2) \varepsilon_{0,1} \cong \hbar^2/(2m^*) \pi^2/(4R^2) - \Delta_{\text{so}}$.

A továbbiakban levezetünk egy közelítő összefüggést az állapotok számára, felhasználva

$$N_{\text{asymp}}(\varepsilon) = 2 \sum_{m=0}^{m_{\text{max}}} \sum_{n=1}^{n_{\text{max}}} \Theta(\varepsilon - \varepsilon_{m,n}), \quad (2.48)$$

alakot, ahol $\varepsilon_{m,n}$ -t a (2.47) egyenletben adtuk meg, és a 2-es faktoriala a Kramers-degenerációt vettük figyelembe, és végül $m_{\text{max}} = [\sqrt{\varepsilon_{\text{so}}}]$ és $n_{\text{max}} = [(2\sqrt{\varepsilon_{\text{so}}}/\pi)]$ a legnagyobb m és n , melyre $\varepsilon_{m,n}$ még negatív. Itt $[\cdot]$ az egészrész függvényt jelöli.

Alkalmazva a Poisson-féle összegzési formulát [49, 130] a (2.48) kifejezés m szerinti összegzésében, és megtartva csak a nem-oszcilláló tagokat a következőt kapjuk:

$$N_{\text{asymp}}(\varepsilon) = 2 \sum_{n=1}^{n_{\text{max}}} \int_{-\frac{1}{2}}^{m_{\text{max}} + \frac{1}{2}} \Theta(\varepsilon - \varepsilon_{m,n}) dm = 2 \sum_{n=1}^{n_{\text{max}}} m^*(\varepsilon, n), \quad (2.49)$$

ahol $m^*(\varepsilon, n)$ az $\varepsilon_{m,n} = \varepsilon$ egyenlet megoldása m -re adott ε és n mellett. Így a (2.49) egyenletből Debye-közelítésben, rövid számolás után az aszimptotikus állapotok számára kapjuk:

$$N_{\text{asymp}}(\varepsilon) = 2 \sqrt{\varepsilon_{\text{so}}} \sum_{n=0}^{n_{\text{max}}} \sqrt{\frac{\varepsilon - \varepsilon_n^*}{\varepsilon + \varepsilon_{\text{so}}}} \Theta(\varepsilon - \varepsilon_n^*), \quad \text{ahol} \quad (2.50a)$$

$$\varepsilon_n^* = \varepsilon_{0,n} = \left(\frac{n\pi}{2}\right)^2 - \varepsilon_{\text{so}} \quad \text{és} \quad \varepsilon < 0. \quad (2.50b)$$

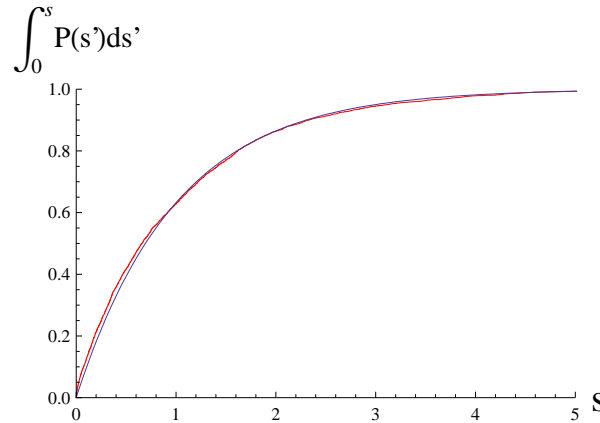
Az eredmény az egzakt állapotok számával együtt a 2.7 ábrán látható. Az egyezés jól láthatóan kitűnő a teljes negatív spektrumon, és csak a zérushoz közeli energiákon figyelhető meg kis eltérés. Nyitott kérdés, hogy a fenti eredmény hogyan magyarázható meg szemiklasszikus módszerekkel, hogyan vezethető le a (2.47) eredmény. Ez lehet esetleg egy későbbi kutatás tárgya. Egy lehetséges út az a szemiklasszikus közelítés, melyet a [133, 134] cikkek szerzői dolgoztak ki.

Az állapotsűrűség az $N(E)$ állapotok számának E energia szerinti deriváltja, ezért kör alakú Rashba-biliárdra az állapotsűrűség négyzetgyökös szingularitást (Van Hove-singularitást) mutat $E_n^{\text{sing}} = \hbar^2/(2m^*R^2) \varepsilon_n^*$ energiáknál. Ha a kör alakú Rashba-biliárdhoz kontaktusokat kapcsolnánk, akkor ebben a nyitott rendszerben a vezetőképességnek egy hirtelen változását várhatjuk az E_n^{sing} negatív energiákon, hiszen a vezetőképesség arányos az állapotsűrűséggel.

2.2.5. Kitekintés

Mielőtt levonánk a konklúziókat röviden tekintsük át a szintstatisztikával kapcsolatos eredményeinket! Ezután felsorolunk néhány elméleti kérdést is a Rashba-biliárdokkal kapcsolatban.

Mint láttuk a Schrödinger-egyenlet kör alakú Rashba-biliárdra szeparálható polárkoordinátákban, ezért a rendszer integrálható. A kvantumkáosz kapcsán korábban megmutatták, hogy integrálható rendszerekben az energiaszintek statisztikája *Poisson típusú* (lásd például a [46] könyvet). Ennek érdekében megvizsgáltuk a numerikusan kapott egzakt energiaszintek eloszlását. Tekintsük az egymást követő nemdegenerált (Kramers-degeneráció) E_n szinteket, melyeket numerikusan a (2.37) szekuláris egyenletből nyerünk. Ezután elkészítjük a kvantumkáoszban szokásos x_n „unfolded” spektrumot, majd ebből a szomszédos szinttávolságok s_n szekvenciáját a következő módon: $x_n = \bar{N}(E_n)$ és $s_n = x_{n+1} - x_n$, ahol $\bar{N}(E)$ -t a (2.46) egyenlet definálja. Ekkor az s_n szomszédos szinttávolságok eloszlása: $P(s) = \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} \delta(s - s_n)$, ahol \mathcal{N} az s_n szinttávolságok száma. A véletlen mátrix elmélet szerint $P_{\text{elmélet}}(s) = e^{-s}$ [130]. Ezt nevezik Poisson-statisztikának a kvantumkáosz területén. A Poisson-statisztika helyett a numerikus eredményekkel való könnyebb összehasonlítás érdekében célszerű kiszámolni az ún. kumulatív eloszlásfüggvényt, azaz $P(s)$ integrálját: $\int_0^s P(s') ds' = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} \Theta(s - s_n)$. Ezt a mennyiséget egyszerűbb a numerikusan nyert energiaszintekből kiszámítani. Hasonlóan a $P_{\text{elmélet}}(s)$ elméleti eloszlásfüggvény kumulatív eloszlásfüggvénye: $\int_0^s P_{\text{elmélet}}(s') ds' = 1 - e^{-s}$. A 2.9 ábrán összehasonlítottuk a numerikusan kapott energiaszintek szinttávolságainak kumulatív eloszlásfüggvényét az elméletileg jó-solt $1 - e^{-s}$ függvénnyel. Látható, hogy az egyezés még kis s -re is nagyon jó. Valóban,



2.9. ábra. A numerikusan kapott (piros vonal) és az elméletileg jó-solt (kék vonal) kumulatív eloszlásfüggvény 3194 energiaszintet véve. Itt is $k_{\text{so}}R = 70$.

kör alakú Rashba-biliárdra a szomszédos energiaszintek távolságának $P(s)$ eloszlása Poisson típusú, ahogy ezt egy szeparálható rendszertől a véletlen mátrix elmélet alapján várjuk.

Nem kör alakú Rashba-biliárdokra a spin-pálya csatolás megszüntetheti a rendszer integrálhatóságát, és ekkor a véletlen mátrix elmélet szerint a szintstatisztikát az ún. szimplektikus sokaság határozza meg [46, 135]. Megjegyezzük azonban, hogy bizonyos átmeneti statisztika is lehetséges, ami nem írható le a véletlen mátrix-elmélettel. Ilyen például a téglalap alakú Rashba-biliárd esete Dirichlet-határfeltétellel és a kis k_{so}

értékeknél [122]. Ekkor a téglalap alakú biliárd spin-pálya csatolás nélkül integrálható, de véges spin-pálya csatolásnál már nem.

Most felsorolunk néhány elméletileg nyitott kérdést. A periódikus pályák elméletének kidolgozásához alapvető fontosságú a Weyl-formula ismerete Rashba-biliárdokra. Normál biliárdokra (kétdimenziós elektron-gáz, spin-pálya csatolás nélkül) lásd a [42, 49] műveket, míg harmonikus potenciállal bezárt Rashba rendszerre jó példa található a [134] hivatkozás cikkeiben. A Rashba-biliárdokban az elektron dinamikájának jobb megértéséhez célszerű lenne alkalmazni Littlejohn és Flynn szemiklasszikus elméletét, melyet általánosan, többkomponensű hullámfüggvénnyel leírható rendszerekre dolgoztak ki [133]. Ebben a fejezetben vázolt Green-függvényes módszer kiindulási alap lehet olyan mérhető mennyiségek kiszámításához Rashba-biliárdokban, mint például a mágnesezettség [136] vagy az állandósult áramok (angolul persistent currents) [112].

Összefoglalva, ebben a fejezetben tanulmányoztuk az elektronok dinamikáját egy olyan zárt tartományban, biliárdban, amelyben a Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás véges. Kiszámoltuk a Green-függvényt ilyen Rashba-féle Hamilton-operátorral leírható rendszerre és kör alakú Rashba-biliárdokra Dirichlet-határfeltétel esetén is. A szemiklasszikusan számolt állapotsűrűség jó egyezésben van az egzaktul, numerikusan számolttal. Kör alakú Rashba-biliárdokban az energiaspektrum negatív részén az állapotsűrűség bizonyos energiákon négyzetgyökös, Van Hove-szingularitást mutat. Ebben a fejezetben — a dolgozat terjedelme miatt — nem vizsgáltuk a spin-operátor kvantummechanikai átlagát a kör alakú Rashba-biliárd egyes sajátállapotaira vonatkozóan. Azonban az [A14] cikkünkben megállapítottuk, hogy szimmetria okok miatt a spin vektora csak a biliárd síkjára merőleges lehet (legyen ez a z tengely), és az $m = 0$ kvantumszámra, illetve a közel zérus energia-sajátértékeknél a spin $\langle \sigma_z \rangle_{m,n}$ kvantummechanikai átlaga ugrásszerűen megnő. Gyenge mágneses térbe helyezve a rendszert a Zeeman-felhasadás arányos a spin z komponensének nagyságával, és így kísérletileg kimutatható.

2.3. Spinfüggő szórás

A fejezet további részében a [A13] cikkünkben közölt eredményeinket foglaljuk össze.

Szórási kísérletekben a spin-pálya kölcsönhatás megszünteti a spin forgási szimmetriáját, és így befolyásolja a szóródó részecske spinpolarizációját [137]. Ugyanakkor a spin-pálya kölcsönhatás miatt a szórási hatáskeresztmetszet is aszimmetrikussá válhat a szög függvényében, ezt nevezik ferde szórásnak (skew-scattering) [137–139]. A magfizikában ezt a jelenséget ki is használják spinpolarizált neutronok előállításához [140]. Félvezetőkben erős spin-pálya kölcsönhatás esetén az energia-sajátállapotok spinfüggők, és mágneses tér nélkül is megfigyelhetünk spin szerinti felhasadást a diszperziós relációban, ahogy ezt a bevezető 2.1 szakaszban láttuk. Ez az effektus egészen nagy lehet alacsony dimenziós szerkezetekben, amelyekben a spin-pálya kölcsönhatást okozó kvantumgödör potenciálja tükrözésre aszimmetrikus, mint például a 2.1 részben részletesebben ismertetett Rashba-rendszerekben (lásd még [84, 88]). Láttuk, hogy ilyen rendszerekben a spin-pálya kölcsönhatás erősségét külső elektromos térrel változtathatjuk, és így a Datta és Das által javasolt spintranzisztor [79] új lehetőségeket vetett fel a spintronika területén [96]. Ugyanakkor, fundamentális és sajnos még nem teljesen megoldott probléma, a spinpolarizált elektronok létrehozása, detektálása, illetve kontrollálása. Számos javaslat született spinpolarizált elektronnyaláb keltésére [141]. Az eddigi kutatások szerint, sajnos a nyilvánvalónak látszó ferromágnes-félvezető szerkezetek erre nem alkalmasak, mert a ferromágnesből kilépő elektronok spinpolarizációja jelentősen lecsökken, amikor az elektron a félvezető tartományba jut. Így, úgy tűnik, hogy csak a teljesen félvezető alapon készített eszközök jöhetnek szóba [142].

Nemrég, több ilyen, teljesen félvezető alapú spinpolarizáló eszközt javasoltak, melyekben azt használták ki, hogy az α Rashba-féle spin-pálya csatolás térben megfelelően tervezett módon változik [143]. Térbelileg változó spin-pálya csatolást például úgy lehet létrehozni, hogy a félvezető szendvicsszerkezet fölé (lásd a 2.1 ábrát) egy kicsi extra elektródát helyezünk, ami megváltoztatja α értékét az elektróda alatt [144]. További lehetőség, hogy az α paraméter erősen függ attól, hogy a hullámfüggvény mennyire hatol be a rétegekbe [145], de inhomogén réteg növesztésével is elérhetjük a spin-pálya csatolás modulációját [146].

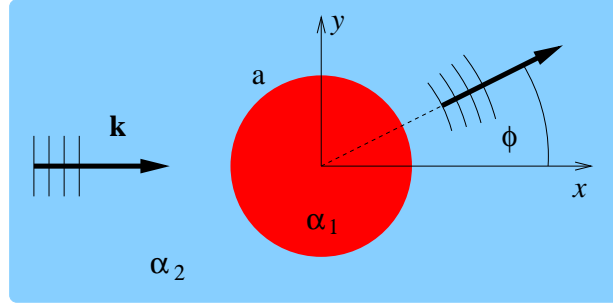
Ebben a részben megmutatjuk, hogy a bejövő polarizálatlan elektronnyaláb a változó α spin-pálya csatolás miatt rugalmasan szóródva az előre szórési szöghöz közeli irányokban majdnem teljesen polarizált lesz. Ennek érdekében tekintsük egy olyan rendszert, amelyben az $\alpha(\mathbf{r})$ spin-pálya csatolás a kétdimenziós elektrongáz síkjában az

$$\alpha(\mathbf{r}) = \alpha_1 \Theta(a - |\mathbf{r}|) + \alpha_2 \Theta(|\mathbf{r}| - a), \quad (2.51)$$

módon változik, ahol a a szórási tartomány sugara, Θ a Heaviside-függvény és $\mathbf{r} = (x, y)$ a kétdimenziós elektrongáz síkjában a helyvektor (lásd a 2.10 ábrát). A rendszer Hamilton-operátorát a Rashba-féle (2.2) szimmetrizált⁷ operátor írja le:

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + \frac{\alpha(\mathbf{r})}{2\hbar} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) + (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) \frac{\alpha(\mathbf{r})}{2\hbar}, \quad (2.52)$$

⁷Mivel $\alpha(\mathbf{r})$ helyfüggő a Hamilton-operátor spin-pálya kölcsönhatását leíró részét szimmetrizálni kell annak érdekében, hogy a rendszer Hamilton-operátora hermitikus legyen.



2.10. ábra. A bejövő elektron \mathbf{k} hullámszámvektorral adott síkhulláma egy helytől függő $\alpha(\mathbf{r})$ spin-pálya csatolás következtében szóródik, melynek egy része a φ szórási szög irányában terjed. A piros a sugarú tartományon belül a spin-pálya csatolás értéke konstans α_1 , kívül pedig α_2 .

ahol $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ az impulzus-operátor, m^* az elektron effektív tömege, és σ_x, σ_y a Pauli-mátrixok. Egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy $\alpha_2 = 0$ és $\alpha_1 = \alpha$ állandó érték. Számolásunk könnyen általánosítható más $\alpha(\mathbf{r})$ -függésre is. Nemrégén hasonló szórási problémát vizsgáltak állandó $\alpha(\mathbf{r})$ -ra, de az elektrongáz síkjában változó elektrosztatikus potenciált feltételezve [128, 148].

A spinfüggő szórási folyamatok leírásához célszerű bevezetni a spinsűrűség-mátrix fogalmát [138, 139, 149]. Ennek segítségével explicit formulákat vezethetünk le a differenciális és a teljes szórási hatáskeresztmetszetre és a szórt hullám \mathbf{P}^{sc} spinpolarizációjára a bejövő elektronnyaláb síkhullámjának \mathbf{P}^{inc} spinpolarizációjának a függvényében.

Előtte áttekintjük a spinsűrűség-mátrix módszert. A \mathbf{k} hullámszámvektorú bejövő síkhullám alakja: $\psi^{\text{inc}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} |\gamma\rangle$, ahol $|\gamma\rangle$ a spinállapotot jelöli. Kétdimenzióban a szórt hullám aszimptotikus alakja a szórócentrumtól távol:

$$\psi^{\text{sc}}(r, \varphi) \sim \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}} \mathbf{f}(\varphi) |\gamma\rangle, \quad (2.53)$$

ahol $\mathbf{f}(\varphi)$ a szórási amplitúdó (ez a spintérben egy 2×2 -es mátrix), és \mathbf{k} -tól, illetve a φ szórási szögtől függ. A $\mathbf{f}(\varphi)$ szórási amplitúdó kifejezhető a σ_0 egységmátrix, illetve a Pauli-mátrixokból képzett $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ vektor segítségével⁸:

$$\mathbf{f}(\varphi) = \sum_{k=0}^3 u_k(\varphi) \sigma_k = u_0(\varphi) \sigma_0 + \mathbf{u}(\varphi) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.54)$$

ahol u_0 és $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ a szórási probléma Schrödinger-egyenletének megoldásából határozható meg.

A bejövő hullám spinsűrűség-mátrixa $\rho^{\text{inc}} = \frac{1}{2} (\sigma_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}^{\text{inc}})$, ahol $\mathbf{P}^{\text{inc}} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{\text{inc}} = \text{Tr}(\rho^{\text{inc}} \boldsymbol{\sigma})$ a hullám polarizációja. A szórt hullám spinsűrűség-mátrixa kapcsolatba

⁸Az áttekinthetőbb formalizmus érdekében a továbbiakban a $\sigma_1 \equiv \sigma_x, \sigma_2 \equiv \sigma_y, \sigma_3 \equiv \sigma_z$ jelöléseket használjuk a Pauli-mátrixokra.

hozható a bejövő hullám spinsűrűség-mátrixával [138] :

$$\rho^{\text{sc}} = \frac{\mathbf{f}\rho^{\text{inc}}\mathbf{f}^\dagger}{\text{Tr}(\mathbf{f}\rho^{\text{inc}}\mathbf{f}^\dagger)}, \quad (2.55)$$

ahol Tr a spúrképzést jelöli a spinállapotokra. Felhasználva a (2.54) egyenletet a differenciális szórási hatáskeresztmetszet:

$$\frac{d\sigma}{d\varphi} = \text{Tr}(\mathbf{f}\rho^{\text{inc}}\mathbf{f}^\dagger) = c + \mathbf{v} \cdot \mathbf{P}^{\text{inc}}, \quad \text{ahol} \quad (2.56a)$$

$$c = \sum_{k=0}^3 |u_k|^2 \quad \text{és} \quad \mathbf{v} = 2\text{Re}(u_0^*\mathbf{u}) - i(\mathbf{u} \times \mathbf{u}^*). \quad (2.56b)$$

Itt $\text{Re}(\cdot)$ a komplex szám valós részét és a $*$ a komplex konjugálást jelöli. Megjegyezzük, hogy általában $\mathbf{u} \times \mathbf{u}^*$ nem zérus, de mindig tisztán képzetes vektor. Hasonlóan, a szórt hullám \mathbf{P}^{sc} polarizációs vektora:

$$\mathbf{P}^{\text{sc}} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{\text{sc}} = \text{Tr}(\rho^{\text{sc}} \boldsymbol{\sigma}) = \frac{\mathbf{w} + \mathcal{M}\mathbf{P}^{\text{inc}}}{c + \mathbf{v} \cdot \mathbf{P}^{\text{inc}}}, \quad (2.57a)$$

ahol $\mathbf{w} = 2\text{Re}(u_0^*\mathbf{u}) + i(\mathbf{u} \times \mathbf{u}^*)$ és az \mathcal{M} mátrix komponensei:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{ij} &= (|u_0|^2 - |\mathbf{u}|^2) \delta_{ij} + 2\text{Re}(u_i^*u_j) \\ &+ 2\sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \text{Im}(u_0^*u_k), \end{aligned} \quad (2.57b)$$

ahol $i, j = 1, 2, 3$ és δ_{ij} , illetve ε_{ijk} a Kronecker-delta és a Levi-Civita-szimbólumot, míg $\text{Im}(\cdot)$ a komplex szám képzetes részét jelöli. Az \mathcal{M} mátrix komponensei valós számok.

A kvantummechanikai szórási problémákban jól ismert optikai tétel [81] spinfüggő változatát is a Gauss-féle hullámcsomag időbeni fejlődésének vizsgálatával lehet levezetni, és a következőt kapjuk:

$$\sigma_{\text{tot}} = \sqrt{\frac{8\pi}{k}} \text{Im} \left\{ e^{-i\frac{\pi}{4}} [u_0(0) + \mathbf{u}(0) \cdot \mathbf{P}^{\text{inc}}] \right\}, \quad (2.58)$$

ahol σ_{tot} a teljes szórási hatáskeresztmetszet.

Mint látható, az összes fizikai mennyiség az $u_k(\varphi)$ együtthatókkal van kifejezve, ami az $\mathbf{f}(\varphi)$ szórási amplitúdót definiálja a (2.54) egyenleten keresztül. Ezeket az ismeretlen $u_k(\varphi)$ együtthatókat a kétkomponensű spinorokra kiterjesztett parciális hullámok módszerével számolhatjuk ki, mint például a [128] cikkben. Legyen a spinkvantálási tengely a z tengely! Ekkor a sajátspinorok, azaz a σ_z Pauli-mátrix sajátvektorai γ_σ , ahol $\gamma_+ = (1, 0)^T$, ha $\sigma = +1$, és $\gamma_- = (0, 1)^T$, ha $\sigma = -1$ (T a vektor transzponálását jelöli). Innentől a $\sigma = \pm 1$ spinkvantumszám helyett egyszerűen \pm írunk. Mivel a (2.52) Hamilton-operátor kommutál a $J_z = -i\hbar\partial_\varphi + \frac{\hbar}{2}\sigma_z$ teljes impulzusmomentum-operátorral bármely parciális hullám, ami megoldása a Schrödinger-egyenletnek indexelhető a bejövő elektron hullámfüggvényének $j \in \mathbb{J}$ kvantumszámával, illetve a σ spin kvantumszámával. Itt $\mathbb{J} = \{\dots, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots\}$.

Ekkor a bejövő síkhullám terjedésési irányát az x tengely irányában választva polárkoordinátákban az E energiájú és σ spin kvantumszámú bejövő síkhullám kifejezhető a parciális hullámok összegére [50]:

$$\phi_\sigma(\mathbf{r}) = e^{ikx}\gamma_\sigma = \frac{1}{2\sqrt{-\sigma}} \sum_{j \in \mathbb{J}} i^{j+1/2} \left[h_{j,\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}) + h_{j,\sigma}^{(2)}(\mathbf{r}) \right], \quad \text{ahol} \quad (2.59a)$$

$$h_{j,\sigma}^{(1,2)}(\mathbf{r}) = H_{j-\sigma/2}^{(1,2)}(kr) e^{i(j-\sigma/2)\varphi} \gamma_\sigma, \quad (2.59b)$$

a kimenő (a felső indexben 1) és a befutó (a felső indexben 2) hullámok, és $k = |\mathbf{k}| = \sqrt{2m^*E}/\hbar$ bejövő síkhullám hullámszámvektorának a nagysága. Itt $H_m^{(1,2)}(z)$ az első, illetve másodfajú m -ed rendű Hankel-függvények.

A szórási probléma leírásához először tekintsük $h_{j,\sigma}^{(1,2)}(\mathbf{r})$ egyetlen parciális hullám szórását! A j -dik parciális hullám a szórási tartományon kívül és belül a következő alakú:

$$\psi_{j,\sigma}^{(\text{out})} = h_{j,\sigma}^{(2)} + S_{\sigma,\sigma}^{(j)} h_{j,\sigma}^{(1)} + S_{-\sigma,\sigma}^{(j)} h_{j,-\sigma}^{(1)}, \quad \text{ha } r > a, \quad (2.60a)$$

$$\psi_{j,\sigma}^{(\text{in})} = A_{+,\sigma}^{(j)} \chi_{j,+} + A_{-,\sigma}^{(j)} \chi_{j,-}, \quad \text{ha } r < a, \quad \text{és} \quad (2.60b)$$

$$\chi_{j,\tau}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \tau J_{j-1/2}(k_\tau r) e^{-i\varphi/2} \\ J_{j+1/2}(k_\tau r) e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} e^{ij\varphi}, \quad (2.60c)$$

ahol $J_m(x)$ a Bessel-függvény, $\tau = \pm 1$ a Rashba-rendszer diszperziós relációjának ágát jelöli (lásd a (2.4) egyenletet), míg k_τ -t és k_{so} -t a (2.7), illetve a (2.4b) egyenletekben definiáltuk [151, A12, A14]. Itt jegyezzük meg, hogy a szórási tartományon belül a $\chi_{j,\tau}(\mathbf{r})$ sajátfüggvény egy fázisfaktortól eltekintve megegyezik a (2.28) egyenletben definiált origóban reguláris sajátfüggvénnyel, ha az indexelésnél a $J_z = -i\hbar\partial_\varphi + \frac{\hbar}{2}\sigma_z$ teljes impulzusmomentum-operátor j félegész sajátértékei helyett az $L_z = -i\hbar\partial_\varphi$ impulzusmomentum-operátor m sajátértékeit vesszük. Az ismeretlen $A_{\pm,\pm}^{(j)}$ és $S_{\pm,\pm}^{(j)}$ együtthatókat a határfeltételekből határozhatjuk meg.

Ezek a határfeltételek nem a szokásos határfeltételek, melyeknél a hullámfüggvény és deriváltjának folytonosságát követeljük meg. Ennek oka, hogy a rendszer Hamilton-operátora spin-pálya kölcsönhatást is tartalmaz. Korábban éppen emiatt, bizonyos spintronikai rendszerekre a számolások hibásak voltak. A helyes határfeltételeket először Zülicke és Schroll vezette le [152]. Röviden vázoljuk a levezetést, mivel az egyáltalán nem triviális, és egyben tanulságos is. Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy az $\alpha(x)$ spin-pálya csatolás csak x -től függ, és ugrásszerűen viselkedik az $x = 0$ környékén úgy, hogy az $x < 0$ tartományban zérus, míg az $x > 0$ féltérben $x \rightarrow 0^+$ -ra $\alpha(x) \rightarrow \alpha_0$ véges értékhez tart! Ennek általánosítása már könnyen elvégezhető. Induljunk ki a $H\psi = E\psi$ Schrödinger-egyenletből, ahol H -t a szimmetrizált (2.52) egyenlet definiál. Integráljuk az egyenletet x szerint $-\varepsilon$ -től $+\varepsilon$ -ig, ahol $\varepsilon > 0$ (és a

számolás végén az $\varepsilon \rightarrow 0$ határátmenetet vesszük):

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right]_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} + \frac{1}{2i} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \alpha(x) \left(\sigma_x \frac{\partial}{\partial y} - \sigma_y \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx \\ + \frac{1}{2i} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \left(\sigma_x \frac{\partial}{\partial y} - \sigma_y \frac{\partial}{\partial x} \right) \alpha(x) \psi dx = 0. \end{aligned} \quad (2.61)$$

Itt kihasználtuk, hogy a Schrödinger-egyenlet jobb oldala az integrálás és az $\varepsilon \rightarrow 0$ határátmenet után zérus, mivel ψ folytonos függvény. A fenti egyenletben az első integrál zérushoz tart, ha $\varepsilon \rightarrow 0$, mivel az integrál kis ε -ra közelíthető egy ε -nal arányos mennyiséggel. A második integrálban az $\alpha(x)\psi$ szorzatot kell deriválni, és így megjelennek az $\alpha(x)$, illetve ψ deriváltjai. Az integrál, ami ψ deriváltjait tartalmazza megegyezik a fenti egyenlet első integráljával, és ezért a fentiek szerint zérus $\varepsilon \rightarrow 0$ -ra. Míg az integrál, ami $\alpha(x)$ deriváltjait tartalmazza a $\frac{\partial \alpha}{\partial y} = 0$ miatt arányos az $\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{\partial \alpha}{\partial x} \psi dx$ integrállal, ami $\alpha_0 \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \delta(x) \psi dx = \alpha_0 \psi(0)$ értékkel egyenlő, ha $\varepsilon \rightarrow 0$. Végül összeszedve az összes szorzófaktort a fenti egyenlet — a probléma hullámfüggvényeinek deriváltjaira vonatkozó határfeltétel — az $\varepsilon \rightarrow 0$ határátmenet után a következő alakú:

$$\left[\frac{\partial \psi}{\partial x} \right]_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} - ik_{\text{so}} \sigma_y \psi(0) = 0, \quad (2.62)$$

ahol $k_{\text{so}} = m^* \alpha_0 / \hbar^2$.

Visszatérve a (2.60) egyenletben adott hullámfüggvényekre a (2.62) határfeltételt célszerű átírni polárkoordinátákban. Ennek levezetése hasonló módon történik, mint a fenti határfeltétel, és végül a (2.60) hullámfüggvényekre érvényes határfeltételek:

$$\psi_{j,\sigma}^{(\text{out})} \Big|_{r=a} = \psi_{j,\sigma}^{(\text{in})} \Big|_{r=a}, \quad (2.63a)$$

$$\partial_r \psi_{j,\sigma}^{(\text{out})} \Big|_{r=a} = (\partial_r - ik_{\text{so}} \sigma_\varphi) \psi_{j,\sigma}^{(\text{in})} \Big|_{r=a}, \quad (2.63b)$$

ahol $j \in \mathbb{J}$ és $\sigma = \pm 1$, míg $\sigma_\varphi = -\sin \varphi \sigma_x + \cos \varphi \sigma_y$. Adott j -re ezek az egyenletek 8 darab Bessel- és Hankel-függvényeket tartalmazó inhomogén lineáris egyenletrendszerre vezetnek a 8 db ismeretlen $A_{\pm,\pm}^{(j)}$ és $S_{\pm,\pm}^{(j)}$ együtthatókra⁹. Az egyenletek explicit alakja független a φ szögtől. Az együtthatók numerikusan meghatározhatók. Könnyen belátható, hogy érvényesek a $S_{\sigma,\sigma}^{(j)} = S_{-\sigma,-\sigma}^{(-j)}$ és $S_{-\sigma,\sigma}^{(j)} = S_{\sigma,-\sigma}^{(j)} = S_{-\sigma,\sigma}^{(-j)} = S_{\sigma,-\sigma}^{(-j)}$ szimmetria-relációk, ahol $j \in \mathbb{J}$ és $\sigma = \pm 1$. A továbbiakban feltesszük, hogy numerikus számolásból ismerjük az $S_{\pm,\pm}^{(j)}$ együtthatókat.

A fentiek alapján a teljes hullámfüggvény a szórési tartományon kívül felbontható $\psi_\sigma^{(\text{out})} = \sum_{j \in \mathbb{J}} \psi_{j,\sigma}^{(\text{out})} = \phi_\sigma + \psi_\sigma^{(\text{sc})}$ alakban, ahol $\psi_\sigma^{(\text{sc})}$ a szórt hullám és ϕ_σ a bejövő

síkhullámot a (2.59) egyenlet definiál. Könnyű belátni, hogy $\psi_\sigma^{(\text{out})}$ és $\psi_\sigma^{(\text{in})} = \sum_{j \in \mathbb{J}} \psi_{j,\sigma}^{(\text{in})}$

kielégíti a (2.63) határfeltételeket. Felhasználva a Hankel-függvények aszimptotikus $h_{j,\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}) \sim \sqrt{\frac{2}{i\pi kr}} e^{i(kr - (j-\sigma/2)\frac{\pi}{2})} e^{i(j-\sigma/2)\varphi} \gamma_\sigma$ alakját [50], ahol $r \gg a$, a $\psi_\sigma^{(\text{sc})}$ szórt hullám

⁹Adott j -re és σ -ra a (2.63) egyenlet valójában 4 egyenletet jelent, hiszen ψ kétkomponensű, és ennek dupláját kapjuk $\sigma = \pm 1$ két értékére, innen a 8 db egyenlet.

aszimptotikus alakja kiszámolható. Végül a (2.53)-ból $\langle \gamma_\sigma | \psi_{\sigma'}^{(\text{sc})} \rangle \sim \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}} f_{\sigma, \sigma'}$ adódik, és a (2.54)-ből a következőt kapjuk az u_k együtthatókra:

$$u_0(\varphi) = \sum_{j \in \mathbb{J}^+} \left[B_j \cos\left(j - \frac{1}{2}\right)\varphi + C_j \cos\left(j + \frac{1}{2}\right)\varphi \right], \quad (2.64a)$$

$$u_1(\varphi) = 2 \sin(\varphi/2) \sum_{j \in \mathbb{J}^+} D_j \cos(j\varphi), \quad (2.64b)$$

$$u_2(\varphi) = -2 \cos(\varphi/2) \sum_{j \in \mathbb{J}^+} D_j \cos(j\varphi), \quad (2.64c)$$

$$u_3(\varphi) = i \sum_{j \in \mathbb{J}^+} \left[B_j \sin\left(j - \frac{1}{2}\right)\varphi - C_j \sin\left(j + \frac{1}{2}\right)\varphi \right], \quad (2.64d)$$

ahol a $B_j = (S_{+,+}^{(j)} - 1)/\sqrt{2\pi ik}$, $C_j = (S_{-,-}^{(j)} - 1)/\sqrt{2\pi ik}$, $D_j = S_{-,+}^{(j)}/\sqrt{2\pi ik}$ és $\mathbb{J}^+ = \{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots\}$ jelöléseket vezettük be.

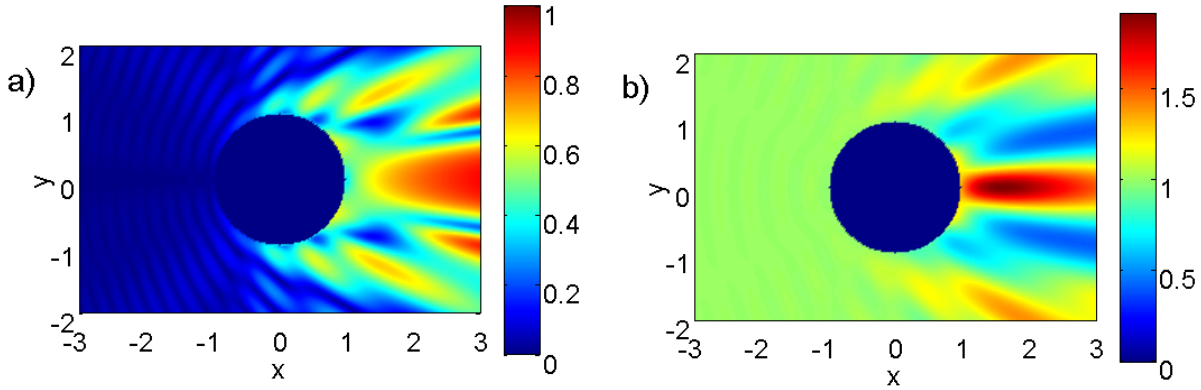
A (2.64) egyenletekből világos, hogy $\varphi = 0$ -ra csak u_0 és u_2 nem zérus. Ennek három következménye van:

- i) A (2.56) egyenlet szerint a differenciális szórási hatáskeresztmetszet a bejövő síkhullám \mathbf{P}^{inc} polarizációs vektorának csak az y komponensétől függ (nem függ P_x^{inc} -től és P_z^{inc} -től).
- ii) A (2.57) egyenletből következik, hogy polarizálatlan bejövő elektronnyalábra ($\mathbf{P}^{\text{inc}} = 0$) a szórt hullám polarizációja y irányú az előre szórás irányában, azaz $\varphi = 0$ -ra. Megjegyezzük, hogy ezzel ellentétben a szokásos Mott-szórásnál a polarizációs vektor mindig merőleges a szórási síkra.
- iii) A (2.58) optikai tétel következménye, hogy a teljes szórási hatáskeresztmetszet is csak a polarizációs vektor y komponensétől függ, azaz P_y^{inc} -től.

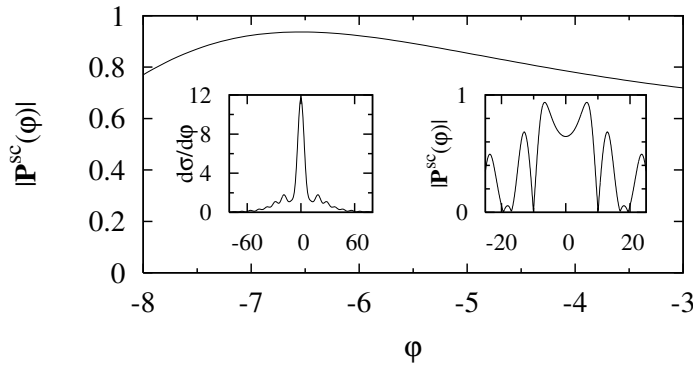
A numerikus számolásokban a szórási folyamatot a ka és $k_{\text{so}}a$ dimenziótlan paraméterekkel jellemezhetjük. A 2.11 a ábra szerint a szórási tartomány közelében az előre szórás irányában (a vörös színű tartományban) a szórt elektronok majdnem teljesen polarizáltak. Ugyanakkor a szórási tartomány bal oldalán a polarizáció nagyon kicsi, hiszen a bejövő síkhullám polarizálatlan és a visszaszórás kicsi. A 2.11 b ábrán az előre szórás irányában a vörös tartomány jelzi, hogy itt a töltéssűrűség nagyobb, mint a bejövő hullám töltéssűrűsége. Mindez azt jelenti, hogy egyrészt a szórási folyamat révén az előre szórás irányában viszonylag jól polarizált elektronnyalábot kapunk. Másrészt a bejövő síkhullám erősen fókuszálódik a szórási tartományhoz közel egy kis területre. A k and k_{so} paraméterek más, kísérletileg elérhető értékei mellett is hasonló eredményeket találtunk.

A fenti eredményeket más módon is megvizsgáltuk. A (2.56) egyenletből számolt differenciális szórási hatáskeresztmetszet és a (2.57) egyenletből számolt $|\mathbf{P}^{\text{sc}}|$ polarizációs vektor nagysága látható a 2.12 ábrán a szórási szög függvényében polarizálatlan bejövő síkhullámra, és kísérletileg releváns paraméterekkel számolva [147]. Az ábrából jól látható, hogy a differenciális szórási hatáskeresztmetszet meglehetősen nagy, és a szórt nyaláb majdnem teljesen polarizált az előre szórás irányához közel, egy szűk szögtartományban.

Megvizsgáltuk a szórás nagyenergiás határesetét is. Ekkor $ka \gg 1$, azaz a Fermi-hullámhossz sokkal kisebb, mint a szórási tartomány a sugara. Ebben az esetben



2.11. ábra. A polarizáció nagyságának (a), illetve a teljes hullámfüggvényhez és a bejövő síkhullámhoz tartozó töltéssűrűség aránya (b). Feltettük, hogy a bejövő síkhullám teljesen polarizálatlan ($\mathbf{P}^{\text{inc}} = 0$), és balról az x tengely irányában terjed. A középső kör alakú részben a spin-pálya kölcsönhatás véges. A koordinátákat a kör a sugarának egységében mértük. A paraméterek: $ka = 7$ és $k_{\text{so}}a = 1$.



2.12. ábra. A $|\mathbf{P}^{\text{sc}}|$ polarizációs vektor nagysága (fő ábrán) és a differenciális szórási hatáskeresztmetszet (bal oldali ábrabetét) a φ szórási szög (fokokban) függvényében teljesen polarizálatlan bejövő síkhullámra. Nagyobb φ szögtartományra (fokokban) a $|\mathbf{P}^{\text{sc}}|$ függését a jobb oldali ábrabetét mutatja. A paraméterek: $ka = 20$ és $k_{\text{so}}a = 4$.

alkalmazhatjuk a Born-közelítést, és megmutatható, hogy a szórási amplitúdó $\mathbf{f} \sim \sigma_y$ módon viselkedik. Így a (2.54) egyenletből $u_0 = 0$ és $\mathbf{u} \sim (0, 1, 0)^T$, míg a (2.57) egyenletből $\mathbf{w} = 0$. Innen következik, hogy polarizálatlan bejövő elektronnyalábra a szórt hullám polarizációja elhanyagolható a nagyenergiás határesetben. Ha a spin-pálya kölcsönhatás mellett egy külső elektrosztatikus potenciált is alkalmazunk, mint például olyan kísérletekben, ahol a lokalizált hullámfüggvény a tartomány határán való reflexió következtében a tükörpontban is lokalizálódik [128], akkor u_0 és u_2 , és emiatt \mathbf{P}^{sc} mindig véges, még Born-közelítésben is.

Összefoglalva, polarizálatlan elektronnyaláb egy olyan kör alakú tartományon való szóródását vizsgáltuk, melyben a Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás nem zérus. Megmutattuk, hogy ekkor a szórt nyaláb majdnem teljesen polarizált az előre szórás irányához közeli szórási szögekre. Így jól megtervezett, térben változó spin-pálya csatolással elérhetjük, hogy mágneses tér nélkül is, pusztán elektrosztatikus úton létrehozunk spinpolarizált elektronokat. Ilyen eszközök segítségével további spintronikai

alkalmazásokra és kvantuminformációs feladatok megoldására nyílik lehetőség.

3. fejezet

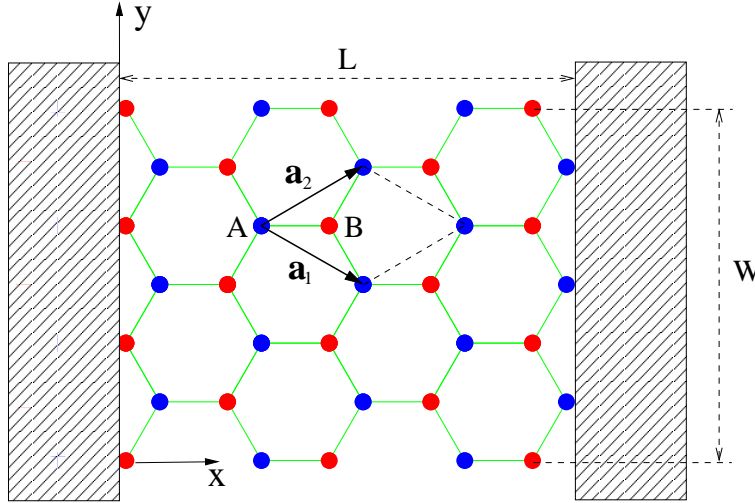
A grafén

3.1. A grafén fizikájának alapjai

A szén a természet és életünk egyik legfontosabb kémiai eleme. Két módosulata, a grafit és a gyémánt régóta ismert. Köztük csak kristályszerkeztükben van különbség, mégis teljesen eltérő tulajdonságokkal rendelkeznek. A grafit hatszöges, míg a gyémánt az ún. gyémánt-szerkeztben kristályosodik [80]. A grafit nagyon puha, átlátszatlan, elektromosan vezető és olcsó, míg a gyémánt nagyon kemény, átlátszó, szigetelő és drága anyag. Jóval később, 1985-ben fedezték fel a C_{60} molekulát, másnéven a fullerén molekulát, amely egy futballabdához hasonlít, hatvan szénatom egy gömb felszínén ötös és hatos gyűrűket alkot [153]. A felfedezésért 1996-ban F. Curl, H. W. Kroto és R. E. Smalley megosztva kaptak kémiai Nobel-díjat. A szén másik, nemrég, 1991-ben felfedezett módosulata a *szén nanocső*, amit először egyértelműen Ijima izolált kísérletileg [154]. A szén nanocsövekről számos összefoglaló található az irodalomban [155, 156].

A manchesteri egyetemen Geim kutatócsoportjának 2004-ben sikerült a grafitból egyetlen atom vastagságú réteget, ún. *grafént* leválasztani [157]. Rögtön ezután Kim csoportjának is sikerült grafént előállítani, és megerősítették Geim csoportjának az eredményeit [158]. A grafénben a szénatomok méhsejt-szerű alakzatban helyezkednek el, ahogy ez a 3.1 ábrán látható. A grafénnek kitüntetett szerepe van hiszen a fullerént, a szén nanocsövet és a grafitot is elvben a grafénből lehet származtatni. A fullerénnél a grafén szerkeztbe 12 darab ötszöges gyűrűt kell beépíteni (ez pozitív görbületű hibát eredményez a grafénben), és így fizikai szempontból a fullerén egy zérus dimenziójú objektum, diszkrét energiaszintjei vannak. A szén nanocsövek a grafénnek hengerré való feltekerésével, és a megfelelő szénatomok összekötésével kaphatók. A szén nanocső így egy kvázi egydimenziós objektumnak tekinthető. Végül a grafit megfelelően elrendezett grafén rétegek egymás fölé helyezésével származtatható, ezért a grafit a szénnek egy háromdimenziós módosulata.

A *Mermin–Wagner-tétel* szerint kétdimenzióban nem létezik hosszútávú rend, kétdimenziós kristály termodinamikailag instabil, ezért nem létezhet [159, 160]. Fizikailag, a termikus fluktuációk olyan nagyságrendű elmozdulásokhoz vezetnek, melyek összemérhetők a rácsállandóval. Így egészen mostanáig úgy gondolták, hogy kétdimenziós szerkezt csak egykristályon növeszthető. Ezért is nagy jelentőségű Geim csoportjának a felfedezése, az akár $100\ \mu\text{m}$ méretű grafénpikkelyek izolálása. Ilyen nagyságú minták már alkalmasak további kutatásokra, mint például transzport-tulajdonságok vizsgálatára. Egy-, kétrétegű grafén mintákat grafitból választották le.



3.1. ábra. Grafén csík két kontaktus között. A csík hossza L , a szélessége W . A grafén kristályszerkezete az \mathbf{a}_1 és \mathbf{a}_2 elemi cellavektorokkal jellemezhető. Minden elemi cellában két bázisatom (két szénatom) van (az ábrán a kék körök az A típusú, a piros körök a B típusú szénatomokat jelöli).

A grafitból mechanikai hasítással különböző vastagságú kristályszemcséket állítottak elő, legegyszerűbben cellux ragasztófelületére ragadt pikkelyeket. A kritikus lépés, hogy az egyrétegű grafén szabadszemmel (optikai mikroszkóppal) is láthatóvá válik, ha a szemcséket Si lapkára helyezzük, melynek oxidált felülete jól megválasztott vastagságú (tipikusan 300 nm vastag SiO_2). Talán soha se fedezték volna fel a grafént, ha nem ezzel a módszerrel keresték volna. Megjegyezzük, hogy ha a SiO_2 vastagsága akárcsak 5 %-kal eltér a grafén már nem látható. Így a látszólag egyszerűnek tűnő eljárás valójában komoly kísérleti felkészültséget igényel. A Mermin–Wagner-tétellel valószínűleg azért nincs ellentmondás, mert a szénatomok közti kölcsönhatás még szobahőmérsékleten is olyan erős, hogy a termikus fluktuációk nem elegendőek diszlokációk, más kristályhibák keltésére vagy a grafénsík harmadik dimenzióban való kis torzulására. Azonban, ez a kérdés még nincs teljesen megnyugtató módon megmagyarázva, további kutatásokra van szükség. Mindenesetre az tény, hogy létezik grafén.

A grafén egyik fontos tulajdonsága, hogy benne a töltéshordozók mozgékonyasága rendkívül nagy, $\mu = 15000 \text{ cm}^2/\text{V s}$, ami a szokásos félvezetőknél jóval nagyobb (Si-ra $\mu = 1350 \text{ cm}^2/\text{V s}$ [83]). Igaz, hogy InSb-ra $\mu = 77000 \text{ cm}^2/\text{V s}$, de ez az érték csak dópolatlan félvezetőre igaz, míg grafénre a mozgékonyaság dópolt esetben is megmarad nagy értékűnek. Így a grafén elektromos transzportja ballisztikus marad akár a szubmikronos skálán ($0,3 \mu\text{m}$) is.

A másik fontos ok, amiért a grafén nagyon rövid időn belül a kutatás közép-pontjába került, az a benne lévő töltéshordozók különleges jellege. A kondenzált anyagok fizikájában a Schrödinger-egyenlet határozza meg az anyagok elektromos tulajdonságait. Ugyanez érvényes grafénre is, de amint azt később látni fogjuk, a töltéshordozók dinamikáját a Schrödinger-egyenlet helyett nagyon jól közelíthetjük a Dirac-egyenlettel. Habár az elektronok mozgása egyáltalán nem relativisztikus, az elektronok kölcsönhatása a méhsejt-rácsban elrendezett szénatomok periódikus potenciáljával olyan kvázirészecske gerjesztést eredményez, ami alacsony energián nagy pon-

tossággal írható le a 2+1 dimenziós zérus tömegű Dirac-egyenlettel. Emiatt gyakran a neutrínókhöz hasonlítják a grafénben fellépő Dirac-fermionokat. Azonban egy fontos különbség, hogy grafénben az effektív „fénysebesség” kb. 300-szor kisebb a vákuumban terjedő fény sebességénél. A grafén felfedezése és elektromos tulajdonságának mérése mostantól lehetőséget nyújt a kvantum-elektrodinamikában ismert különleges jelenségek tesztelésére. Mágneses térben a Dirac-fermionok a „hagyományos” elektronokhoz képest szokatlan módon viselkednek, és új fizikai jelenségek figyelhetők meg, mint például az anomális Hall-effektus. A fenti gondolatokat a következő, bevezető jellegű fejezetekben részletesebben is kifejtjük.

Az elmúlt pár év alatt a grafénről több ezer cikket írtak. Nehéz lenne erről számot adni ebben a dolgozatban. Ehelyett az érdeklődők számára az alábbi összefoglalókat, illetve a bennük található referenciákat javasoljuk. Szerencsére már több összefoglaló mű is megjelent a grafénről, amelyekben számos, a dolgozatban nem érintett kérdést is elemeznek [161–165], sőt egy külön kiadás is megjelent a Solid State Communication folyóiratban [166]. Hazánkban a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetben Bíró László Péter vezetésével, Tapasztó Levente és Dobrik Gergely 2007-ben kezdték el grafén minták előállítását. Pászttázó alagútmikroszkóppal nanométeres pontossággal tudtak grafén mintákat „méretre szabni”, ami lehetővé teszi a grafén elektromos tulajdonságainak tervezését [167]. Dobrik Gergely, ELTE fizikus hallgató ebből a témából készítette szakdolgozatát [168].

3.1.1. A grafén sávszerkezete

A grafén méhsejt-szerű szerkezetének a stabilitása az elektromos tulajdonságainak következménye. A szén s -pályája és a két p -pályája között fellépő sp^2 hibridizáció eredményezi a hatszöges szerkezet stabilitását, kialakítva az ún. σ -kötést, más néven a σ -sávot. Ez a σ -kötés felelős a szén összes módosulatának stabilitásáért. A Pauli-elv miatt ez a sáv teljesen be van töltve, és egy alacsony energiás vegyértékkötési sávnak felel meg. A szénatom harmadik p -pályája, ami merőleges a hatszöges síkra (egyszerűség kedvéért legyen ez a p_z pálya) kovalens kötéssel kapcsolódik a szomszédos szénatom p_z pályájához, létrehozva az ún. π -kötést, más néven a π -sávot. Mivel a p_z pályán egy elektron van a π -sáv félig van betöltve. A továbbiakban ezzel a π -sávval foglalkozunk.

A grafén sávszerkezetét először Wallace tanulmányozta 1947-ben, de abban az időben a tisztán kétdimenziós grafén-szerkezet vizsgálatát pusztán elméleti modellnek tekintették [169]. Valójában, maga Wallace is kiindulási pontnak tekintette ezt a számolást a grafit jobb megértése érdekében, ami nagyon fontos volt az atomreaktorok kifejlesztésében a II. világháború idején. Később a Slonczewski-Weiss-McClure sávszerkezeti-modell nagyon jól leírta a grafit sávszerkezetét, és sikeresen alkalmazták a kísérleti eredmények megértéséhez [170, 171]. Így Wallace eredményei feledésbe merültek, és csak napjainkban a nanocsövek és a grafén iránt megnőtt érdeklődés miatt vált ismét fontossá.

Ebben a fejezetben összefoglaljuk a számolás legfontosabb pontjait, figyelembe véve a szénatomok közti távolabbi szomszéd-kölcsönhatásokat is. Kissé módosítva, Reich és munkatársai munkáját követjük [156, 172]. Szoros kötésű közelítésben (tight-binding

approximation) [83, 173] a \mathbf{k} állapotú¹ Bloch-függvényt két bázisatommal rendelkező grafénben² a következő alakban vehetjük fel:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \left[C_A(\mathbf{k}) \varphi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}) + C_B(\mathbf{k}) \varphi_B(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{d}) \right], \quad (3.1)$$

ahol az összegzés az $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$ rácsvektorokra történik (itt n_1 és n_2 egész számok, N a teljes grafén mintában lévő elemi cellák száma, míg \mathbf{a}_1 és \mathbf{a}_2 a méhsejt-rács elemi cellájának vektorai, lásd a 3.1 ábrát), $\mathbf{d} = (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)/3$ a B típusú szénatom helye az elemi cellában, $\varphi_A(\mathbf{r})$ és $\varphi_B(\mathbf{r})$ az A , illetve a B típusú szénatom p_z állapotához tartozó hullámfüggvény egyre normálva, és végül $C_A(\mathbf{k})$ és $C_B(\mathbf{k})$ lineárkombinációs együtthatók, melyeket

$$H\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (3.2)$$

Schrödinger-egyenlet határoz meg. Beszorozva a (3.2) egyenletet balról a $\varphi_A(\mathbf{r})$, illetve $\varphi_B(\mathbf{r} - \mathbf{d})$ hullámfüggvényekkel, és integrálva \mathbf{r} szerint a $C_A(\mathbf{k})$ és $C_B(\mathbf{k})$ együtthatókra kapunk egy-egy egyenletet.

Az így kapott két egyenletben az egyes tagokat aszerint csoportosíthatjuk, hogy a (3.1) egyenletben szereplő \mathbf{R} elemi rácsvektor melyik értékét veszi fel, ha például az A típusú atomtól számított 1., 2., 3., stb. szomszédtávolságra lévő atomokat tekintjük. Könnyű belátni, hogy a méhsejt-rácsszerkezetben az első-, másod-, és harmadszomszéd távolság $\sqrt{3}a/3 \approx 0,577a$, a , illetve $2\sqrt{3}a/3 \approx 1,155a$, ahol $a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = \sqrt{3}a_{C-C}$ az elemi cella vektor hossza, ami a szén-szén atomok közti, mérésekből ismert $a_{C-C} \approx 1,42 \text{ \AA}$ távolsággal adható meg³. Így például a 3.1 ábrán jelölt A típusú atomtól elsőszomszéd távolságra lévő három darab B típusú atom az \mathbf{R}_1 elemi cellákban található, míg a hat darab másodszomszéd távolságra lévő A típusú atom az \mathbf{R}_2 , illetve a három darab harmadszomszéd távolságra lévő A típusú atom az \mathbf{R}_3 elemi cellákban található, ahol

$$\mathbf{R}_1 = \mathbf{0}, -\mathbf{a}_1, -\mathbf{a}_2, \quad (3.3a)$$

$$\mathbf{R}_2 = \pm\mathbf{a}_1, \pm\mathbf{a}_2, \pm(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2), \quad (3.3b)$$

$$\mathbf{R}_3 = -\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1. \quad (3.3c)$$

Rövid számolás után adott \mathbf{k} mellett a (3.1) Bloch-függvényt meghatározó $C_A(\mathbf{k})$ és $C_B(\mathbf{k})$ együtthatókra következő sajátérték-egyenletet kapjuk:

$$\mathbf{H} \begin{pmatrix} C_A(\mathbf{k}) \\ C_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E(\mathbf{k}) \mathbf{S} \begin{pmatrix} C_A(\mathbf{k}) \\ C_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (3.4a)$$

ahol

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} H_{AA} & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} \end{pmatrix}, \text{ és } \mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_{AA} & S_{AB} \\ S_{BA} & S_{BB} \end{pmatrix}, \quad (3.4b)$$

¹A \mathbf{k} vektor a Brillouin-zónában van, mely az \mathbf{a}_1 és \mathbf{a}_2 elemi cella vektoroktól függ.

²A 3.1 ábrán az \mathbf{a}_1 és \mathbf{a}_2 elemi cella vektorokkal meghatározott elemi cellában a két bázisatom az A típusú szénatom (kék körök) és a B típusú szénatom (piros körök).

³Megjegyezzük, hogy ha az elsőszomszéd közelítésén túl, figyelembe akarunk venni távolabbi szomszédokat is, akkor a másodszomszéd kölcsönhatás mellett, számításba kell venni a harmadszomszéd kölcsönhatást is, mert a másod-, és harmadszomszéd távolságra lévő atomok viszonylag közel vannak egymáshoz.

és a \mathbf{H} hopping mátrix és az \mathbf{S} hullámfüggvény-átfedési integrálokból képzett mátrix az első három szomszédot figyelembe véve a következő alakú:

$$H_{AA} = H_{BB} = \epsilon_0 + \gamma_1 \sum_{\mathbf{R}_2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_2}, \quad (3.5a)$$

$$H_{AB} = H_{BA}^* = \gamma_0 \sum_{\mathbf{R}_1} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_1} + \gamma_2 \sum_{\mathbf{R}_3} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_3}, \quad (3.5b)$$

$$S_{AA} = S_{BB} = 1 + s_1 \sum_{\mathbf{R}_2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_2}, \quad (3.5c)$$

$$S_{AB} = S_{BA}^* = s_0 \sum_{\mathbf{R}_1} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_1} + s_2 \sum_{\mathbf{R}_3} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_3}, \quad (3.5d)$$

ahol $\epsilon_0 = \int \varphi_A^*(\mathbf{r}) H(\mathbf{r}) \varphi_A(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$ a p_z állapothoz tartozó atomi energiaszint (on-site energia), míg a hopping integrálok: $\gamma_0 = \int \varphi_A^*(\mathbf{r}) H(\mathbf{r}) \varphi_B(\mathbf{r} - \mathbf{d}) d^3\mathbf{r}$, $\gamma_1 = \int \varphi_A^*(\mathbf{r}) H(\mathbf{r}) \varphi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2) d^3\mathbf{r}$, és $\gamma_2 = \int \varphi_A^*(\mathbf{r}) H(\mathbf{r}) \varphi_B(\mathbf{r} - \mathbf{R}_3 - \mathbf{d}) d^3\mathbf{r}$, illetve az átfedési integrálok: $s_0 = \int \varphi_A^*(\mathbf{r}) \varphi_B(\mathbf{r} - \mathbf{d}) d^3\mathbf{r}$, $s_1 = \int \varphi_A^*(\mathbf{r}) \varphi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2) d^3\mathbf{r}$, és $s_2 = \int \varphi_A^*(\mathbf{r}) \varphi_B(\mathbf{r} - \mathbf{R}_3 - \mathbf{d}) d^3\mathbf{r}$. Itt a $*$ a komplex konjugálást jelenti.

Adott \mathbf{k} állapotú Bloch-függvényhez tartozó $E(\mathbf{k})$ energiát a (3.4a) $C_A(\mathbf{k})$ -ra és $C_B(\mathbf{k})$ -re homogén egyenlet determinánsának zérushelyei adják. Az eljárás egyszerűen általánosítható és programozható még távolabbi szomszédok figyelembe vételével. A γ_0 , γ_1 , és γ_2 hopping elemek, illetve az s_0 , s_1 , és s_2 átfedési integrálok megtalálhatók Reich és munkatársai cikkében, ahol ezeket az értékeket az első elvekből nyert sávszerkezetből, illesztéssel kapták [172]. A tipikus értékek: $\gamma_0 = -2,97$ eV, $\gamma_1 = -0,073$ eV, $\gamma_2 = -0,33$ eV, illetve $s_0 = 0,073$, $s_1 = 0,018$, és $s_2 = 0,026$.

Legegyszerűbb közelítésben elhanyagoljuk az átfedési integrálokat (ekkor az \mathbf{S} mátrix egységmátrix lesz), és csak elsőszomszéd kölcsönhatásokat veszünk figyelembe (csak γ_0 nem zérus). Könnyű belátni, hogy ekkor a (3.4a) egyenletben a \mathbf{H} hopping mátrix (ebben az esetben \mathbf{H} a rendszer Hamilton-operátorának tekinthető) a következő alakú:

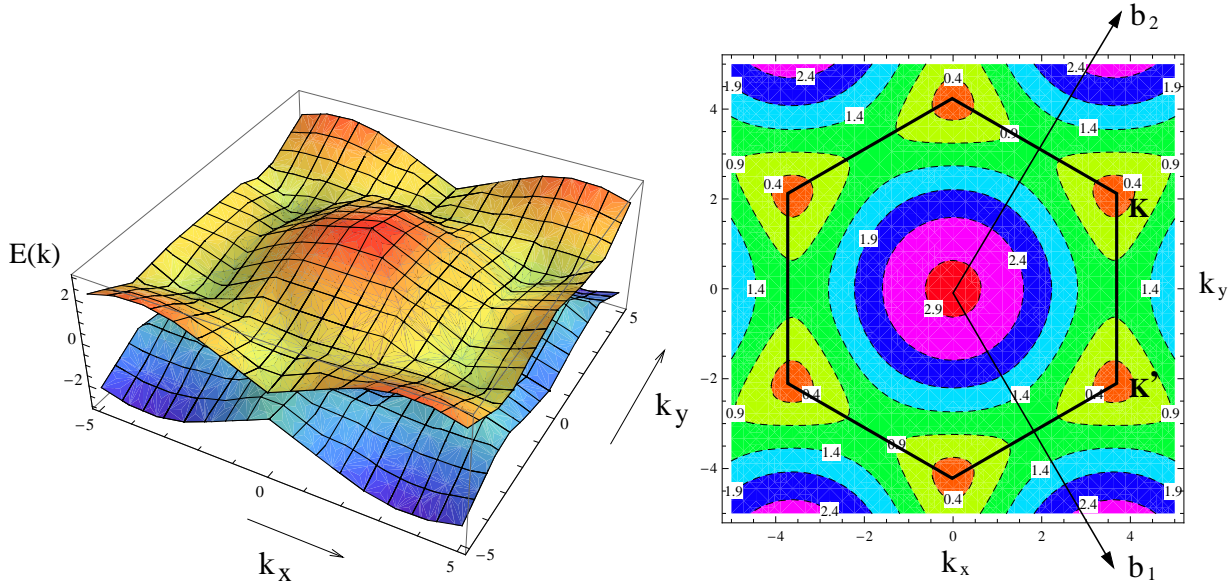
$$\mathbf{H} = \gamma_0 \begin{pmatrix} \epsilon_0 & f(\mathbf{k}) \\ f^*(\mathbf{k}) & \epsilon_0 \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

ahol $f(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}_1} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_1} = 1 + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2}$, és így \mathbf{H} sajátértékei adják a grafén diszperziós relációját a legegyszerűbb közelítésben:

$$E_s(\mathbf{k}) = \epsilon_0 + s|f(\mathbf{k})| = \epsilon_0 + s|\gamma_0|\sqrt{3 + 2\cos\mathbf{k}\mathbf{a}_1 + 2\cos\mathbf{k}\mathbf{a}_2 + 2\cos\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}, \quad (3.7)$$

ahol $s = \pm 1$ a sávindeket jelöli, az $s = +1$ a vezetési sávot (másnéven π sáv), az $s = -1$ a vegyértékkötési sávot (másnéven π^* sáv) írja le. A p_z pályákból kialakuló π -kötésben az $E_{\pm}(\mathbf{k})$ diszperziós relációk \mathbf{k} függése a 3.2 ábrán látható. Az irodalomban gyakran az $s = +1$ vezetési sávot — a félvezetőkkel analóg módon — *részecskesávnak* vagy n -típusú tartománynak, és az $s = -1$ vegyértékkötési sávot pedig *lyuksávnak* vagy p -típusú tartománynak is nevezik. Látható, hogy a diszperziós reláció szimmetrikus a zérus energiára, ezt nevezik részecske-lyuk szimmetriának.

Megmutatható, hogy az ábrán látható fekete hatszög alakú sokszög a méhsejt-rács Brillouin-zónája. A hatszög csúcsait Dirac-pontoknak nevezik (az elnevezés okát



3.2. ábra. A grafén $E_{\pm}(\mathbf{k})$ diszperziós relációja $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ függvényében a (3.7) egyenletből számolva. A bal oldali ábrán az $E_+(\mathbf{k})$ vezetési és az $E_-(\mathbf{k})$ vegyértékkötési sáv háromdimenziós képe, míg a jobb oldali ábrán a vezetési sáv kontúrvonalai láthatók. Az energiát $|\gamma_0|$ egységekben mértük, és $\epsilon_0 = 0$. A 3.1 ábrán látható $\mathbf{a}_1 = a(\sqrt{3}/2, -1/2)$ és $\mathbf{a}_2 = a(\sqrt{3}/2, 1/2)$ elemi cella vektorokhoz tartozó $\mathbf{b}_1 = 2\pi/a(1/\sqrt{3}, -1)$ és $\mathbf{b}_2 = 2\pi/a(1/\sqrt{3}, 1)$ vektorok a reciprokrács elemi cella vektorai. A fekete hatszög jelöli a Brillouin-zónát, és a csúcsai a Dirac-pontok. A $\mathbf{K} = (2\mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_1)/3$ és $\mathbf{K}' = (2\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)/3$ pont a két, nem-ekvivalens Dirac-pont a Brillouin-zónában.

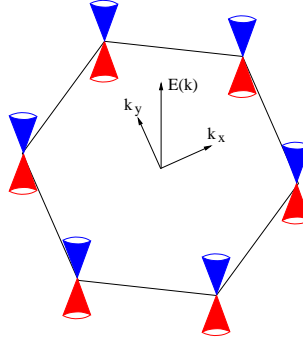
később indokoljuk). A hatszög csúspontjai közül csak két, nem-ekvivalens Dirac-pont tartozik a Brillouin-zónához, melyeket az irodalomban szokásosan \mathbf{K} -val és \mathbf{K}' -vel jelölnek. Két lehetséges nem-ekvivalens Dirac-pontnak választhatjuk a $\mathbf{K} = (2\mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_1)/3$ és $\mathbf{K}' = (2\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)/3$ pontokat, ahol \mathbf{b}_1 és \mathbf{b}_2 a reciprokrács elemi cella vektorai ($\mathbf{a}_i \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$, ahol $i, j = 1, 2$). Hasonlóan könnyű belátni a (3.7) egyenlet alapján, hogy $E_{\pm}(\mathbf{K}) = E_{\pm}(\mathbf{K}') = \epsilon_0$, azaz a Dirac-pontokban az $E_-(\mathbf{k})$ vegyértékkötési sáv (részcseke sáv) és a $E_+(\mathbf{k})$ vezetési sáv (lyuksáv) összeér.

Amint korábban említettük, a π -kötéssel kialakuló két sáv (részcseke- és lyuksáv) semleges grafén lap esetén félig van betöltve, azaz a grafén Fermi-energiája ϵ_0 , melyet az energia nulla-szintjének választásával zérusnak vehetünk (és veszünk a továbbiakban). A Fermi-energia éppen a Dirac-pontokon megy át. Mivel az anyagok elektromos vezetési tulajdonságait a Fermi-energia közelében lévő energiájú elektronok határozzák meg, érdemes a (3.7) diszperziós relációt sorba fejteni a Dirac-pontok környékén. Vezessük be a $\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{K}$, illetve a $\mathbf{k}'' = \mathbf{k} - \mathbf{K}'$ Dirac-pontoktól való eltérést, és tegyük fel, hogy $|\mathbf{k}'|$, illetve $|\mathbf{k}''|$ sokkal kisebb, mint $|\mathbf{K}| = |\mathbf{K}'| = 4\pi/(3a)$. Használjuk a Descartes-koordináta rendszert, azaz $\mathbf{k}' = (k'_x, k'_y)$ (hasonlóan \mathbf{k}'' -ra), és válasszuk a 3.1 ábrán látható módon az $\mathbf{a}_1 = a(\sqrt{3}/2, -1/2)$ és $\mathbf{a}_2 = a(\sqrt{3}/2, 1/2)$ vektorokat! Ekkor a \mathbf{K} , illetve a \mathbf{K}' Dirac-pontok közelében kapjuk:

$$E_s(\mathbf{k}) = \hbar v |\mathbf{k}|, \text{ ahol} \quad (3.8a)$$

$$\hbar v = |\gamma_0| a \sqrt{3}/2. \quad (3.8b)$$

Az egyszerűség kedvéért elhagytuk a vesszőt a \mathbf{k} vektorról. A továbbiakban a \mathbf{k} hullám-számvektort a \mathbf{K} Dirac-ponttól mérjük. Ugyanezt az eredményt kapjuk a többi Dirac-pont közelében is. A diszperziós reláció kúpos alakú, az energia a \mathbf{k} hullám-számvektor nagyságától lineárisan függ. A 3.3 ábrán látható a hatdarab Dirac-kúp.



3.3. ábra. A Dirac-pontok közelében a diszperziós reláció kúpos. Ezeket Dirac-kúpoknak nevezik. A piros/kék a részecskesáv/lyuksáv.

3.1.2. Effektív Hamilton-operátor közelítés

A Dirac-pontok közelében az elektron dinamikájának leírásához szükség van egy effektív Hamilton-operátorra. A továbbiakban az effektív Hamilton-operátor közelítéssel kapott Hamilton-operátor levezetését ismertetjük. A módosított levezetés megtalálható DiVincenzo és Mele [177], Ando és munkatársainak [178], illetve Neto és munkatársainak a cikkeiben [164].

Induljunk ki a (3.6)-ban adott Hamilton-operátorhoz tartozó

$$\epsilon \begin{pmatrix} C_A(\mathbf{k}) \\ C_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \gamma_0 \begin{pmatrix} 0 & \sum_{\mathbf{R}_1} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_1} \\ \sum_{\mathbf{R}_1} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_A(\mathbf{k}) \\ C_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

Schrödinger-egyenletből, és vegyük a Fourier-transzformáltját! Megszorozva mindkét egyenletet $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ -rel és integrálva \mathbf{k} szerint kapjuk

$$\epsilon \psi_A(\mathbf{r}) = \gamma_0 \sum_{\mathbf{R}_1} \psi_B(\mathbf{r} + \mathbf{R}_1), \quad (3.10a)$$

$$\epsilon \psi_B(\mathbf{r}) = \gamma_0 \sum_{\mathbf{R}_1} \psi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1), \quad (3.10b)$$

ahol bevezettük a

$$\psi_A(\mathbf{r}) = \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} C_A(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (3.10c)$$

$$\psi_B(\mathbf{r}) = \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} C_B(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (3.10d)$$

valóstérbeli hullámfüggvényeket. Jelöljük a (3.6) egyenletben a két sajátfüggvényt a $\mathbf{k} = \mathbf{K}$ és a $\mathbf{k} = \mathbf{K}'$ pontokban: $\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r})$ -vel és $\psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})$ -vel! Mivel ezek a hullámfüggvények

Bloch-függvények, igaz hogy

$$\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r} \pm \mathbf{R}_1) = e^{\pm i\mathbf{K}\mathbf{R}_1} \psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}), \quad (3.11a)$$

$$\psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r} \pm \mathbf{R}_1) = e^{\pm i\mathbf{K}'\mathbf{R}_1} \psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}). \quad (3.11b)$$

Az $\epsilon = 0$ Fermi-energia közelében (3.10c) és (3.10d)-ben adott $\psi_A(\mathbf{r})$ és $\psi_B(\mathbf{r})$ hullám-függvények felírhatók $\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r})$ és $\psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})$ bázisában:

$$\psi_A(\mathbf{r}) = F_A^K(\mathbf{r})e^{-i\pi/2}\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) + F_A^{K'}(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}), \quad (3.12a)$$

$$\psi_B(\mathbf{r}) = F_B^K(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) + F_B^{K'}(\mathbf{r})e^{i\pi/2}\psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}), \quad (3.12b)$$

ahol a négy darab $F_{A,B}^K(\mathbf{r})$ és $F_{A,B}^{K'}(\mathbf{r})$ amplitúdókról feltesszük, hogy lassan változnak a grafén rácsállandójához képest. Ezeket a amplitúdókat burkoló függvényeknek (envelope functions) nevezzük. Az $e^{\pm i\pi/2}$ fázisszorzókat csak célszerűségi okok miatt vezettük be. Mivel az $F_{A,B}^K(\mathbf{r})$ és $F_{A,B}^{K'}(\mathbf{r})$ amplitúdók lassan változó függvények, sorbafejthetjük őket:

$$F_{A,B}^K(\mathbf{r} + \mathbf{R}_1) = F_{A,B}^K(\mathbf{r}) + \mathbf{R}_1 \frac{\partial F_{A,B}^K(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}, \quad (3.13a)$$

$$F_{A,B}^{K'}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_1) = F_{A,B}^{K'}(\mathbf{r}) + \mathbf{R}_1 \frac{\partial F_{A,B}^{K'}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}. \quad (3.13b)$$

Beírva a (3.12) hullámfüggvényeket a (3.10) egyenletekbe és felhasználva a (3.13) sorfejtéseket a következőt kapjuk:

$$\begin{aligned} \epsilon \left(F_A^K(\mathbf{r})e^{-i\pi/2}\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) + F_A^{K'}(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) \right) = \\ \gamma_0 \left(\mathbf{g}(\mathbf{K}) \frac{\partial F_B^K(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) + e^{i\pi/2} \mathbf{g}(\mathbf{K}') \frac{\partial F_B^{K'}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \psi'_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \right), \end{aligned} \quad (3.14a)$$

$$\begin{aligned} \epsilon \left(F_B^K(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) + F_B^{K'}(\mathbf{r})e^{i\pi/2}\psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) \right) = \\ -\gamma_0 \left(e^{-i\pi/2} \mathbf{g}(-\mathbf{K}) \frac{\partial F_A^K(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) + \mathbf{g}(-\mathbf{K}') \frac{\partial F_A^{K'}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \psi'_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \right), \end{aligned} \quad (3.14b)$$

ahol $\mathbf{g}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}_1} \mathbf{R}_1 e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_1}$. Itt felhasználtuk még a (3.11) egyenletet, és a $\sum_{\mathbf{R}_1} e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}_1} = 0$ és $\sum_{\mathbf{R}_1} e^{i\mathbf{K}'\mathbf{R}_1} = 0$ összefüggéseket. A fenti két egyenletet az $F_A^K(\mathbf{r})$, $F_B^K(\mathbf{r})$, $F_A^{K'}(\mathbf{r})$ és az $F_B^{K'}(\mathbf{r})$ amplitúdókra felírhatjuk a $\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r})$ és $\psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})$ bázisban:

$$\epsilon F_A^K(\mathbf{r}) = \gamma_0 e^{i\pi/2} \mathbf{g}(\mathbf{K}) \frac{\partial F_B^K(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}, \quad (3.15a)$$

$$\epsilon F_B^K(\mathbf{r}) = -\gamma_0 e^{-i\pi/2} \mathbf{g}(-\mathbf{K}) \frac{\partial F_A^K(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}, \quad (3.15b)$$

$$\epsilon F_A^{K'}(\mathbf{r}) = \gamma_0 e^{i\pi/2} \mathbf{g}(\mathbf{K}') \frac{\partial F_B^{K'}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}, \quad (3.15c)$$

$$\epsilon F_B^{K'}(\mathbf{r}) = -\gamma_0 e^{-i\pi/2} \mathbf{g}(-\mathbf{K}') \frac{\partial F_A^{K'}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}. \quad (3.15d)$$

Könnyű megmutatni, hogy a 3.2 ábrán megadott \mathbf{a}_1 és \mathbf{a}_2 elemi cellavektorokkal $\mathbf{g}(\pm\mathbf{K}) = \sqrt{3}/2(1, \mp i)$ és $\mathbf{g}(\pm\mathbf{K}') = \sqrt{3}/2(1, \pm i)$. Bevezetve a $\mathbf{p} = (p_x, p_y) = \hbar/i(\partial/\partial x, \partial/\partial y)$ impulzus-operátort a fenti négy egyenlet mátrix-alakba írható:

$$\epsilon \begin{pmatrix} F_A^K(\mathbf{r}) \\ F_B^K(\mathbf{r}) \\ F_A^{K'}(\mathbf{r}) \\ F_B^{K'}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = v \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y & 0 & 0 \\ p_x + ip_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_x + ip_y \\ 0 & 0 & p_x - ip_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_A^K(\mathbf{r}) \\ F_B^K(\mathbf{r}) \\ F_A^{K'}(\mathbf{r}) \\ F_B^{K'}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

ahol kihasználtuk, hogy $\gamma_0 < 0$ és a v sebesség (3.8b) definícióját. A jobb oldalon a mátrix blokk-diagonális szerkezetű, az $F_A^K(\mathbf{r})$ és $F_B^K(\mathbf{r})$ amplitúdók a \mathbf{K} pontnak, míg az $F_A^{K'}(\mathbf{r})$ és $F_B^{K'}(\mathbf{r})$ amplitúdók a \mathbf{K}' pontnak felelnek meg. Ennek a sajátértékegyenletnek a mátrixa tömörebben írható a $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ a Pauli-mátrixok segítségével, és így a teljes Hamilton-operátor grafénre a Dirac-pontok közelében a következő alakú:

$$H_{\text{grafén}} = \begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{pmatrix} = v \begin{pmatrix} \sigma_x \hat{p}_x + \sigma_y \hat{p}_y & 0 \\ 0 & \sigma_x \hat{p}_x - \sigma_y \hat{p}_y \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

A fenti Hamilton-operátorral leírható kvázirészecskét *Dirac-fermionnak* nevezik. A H_+ és H_- operátorok a $\sigma_x H_{\pm} \sigma_x = H_{\mp}$ unitér transzformációval egymásba vihetők, ezért a diszperziós reláció a \mathbf{K} és \mathbf{K}' Dirac-pontok közelében azonos. Könnyen belátható, hogy a H_+ operátor síkhullámmegoldásaihoz tartozó sajátértékek megegyeznek a (3.8a)-ben számolt $E_s(\mathbf{k})$ diszperziós relációval. A $H_{\text{grafén}}$ Hamilton-operátor blokk-diagonális szerkezetű, a \mathbf{K} és \mathbf{K}' pontok körül degenerált (az angol irodalomban *valley degeneration*). Ezért legtöbb számolásban ezt a degenerációt egyszerűen egy 2-es szorzóval lehet figyelembe venni. Az elektron spinje szerinti degenerációt (a Hamilton-operátor nem függ az elektron spinjétől) egy további 2-es szorzóval lehet számításba venni.

A H_+ Hamilton-operátor hasonlít a kétdimenziós elektron relativisztikus Dirac-egyenletéhez. Ezért hívják a Brillouin-zóna csúcsait Dirac-pontoknak, és a diszperziós relációt a Dirac-pontok közelében Dirac-kúpoknak. A grafénben az elektron dinamikája megfeleltethető egy Dirac-fermion dinamikájával. Ezt az analógiát először Wallace [169] alkalmazta számolásában, majd később McClure [176], és DiVincenzo és Mele [177]. Az elektron sebessége a (3.8b) egyenlet alapján és $|\gamma_0| \approx 3,16$ eV-tal számolva [179] $v = |\gamma_0|a\sqrt{3}/(2\hbar) \approx c_0/300$, ahol c_0 a fény terjedési sebessége vákuumban.

Fotoelektromos effektussal (az irodalomban ARPES módszernek nevezik az angol Angle Resolved Photoemission Spectrometer alapján) kimérhető a szilárd testekben az elektron-sávszerkezet. Monokromatikus és polarizált fénnel megvilágítva a mintát abból elektronok repülnek ki, melyeknek megmérve az energiáját és a kirepülés irányát következtetni lehet a minta sávszerkezetére. Nemrég az ARPES módszert alkalmazták grafén esetében is, és látványos eredményekkel sikerült igazolni a Dirac-fermionok létezését [174, 175]. A mérést vákuumban, kb. 20 K-en, 95 eV energiájú fotonnal, és 25 meV energiafelbontással végezték. A mérési eredmények kitűnően egyeznek a (3.7) diszperziós relációval $|\gamma_0| = 2,82$ eV és $\epsilon_0 = 0,435$ eV illesztési paraméterekkel. Az ARPES módszer alkalmas többrétegű grafén, illetve az elektron-fonon, elektron-elektron kölcsönhatások vizsgálatára is.

Szoros kötésű közelítésben, figyelembe véve távolabbi szomszédok kölcsönhatásait is a sebesség renormálódik. Számításaim szerint a v sebesség harmadszomszédok fi-

gyelemben vételével a következő:

$$v = \frac{\sqrt{3}a|(s_0 - 2s_2)(\epsilon_0 - 3\gamma_1) + (3s_1 - 1)(\gamma_0 - 2\gamma_2)|}{2(1 - 3s_1)^2\hbar}, \quad (3.18)$$

ami a korábban adott hopping elemekkel, illetve átfedési integrálokkal $v \approx c_0/380$ értékre vezet. Tudomásom szerint, ezt az eredményt meg nem publikálták az irodalomban. Látjuk, hogy a diszperziós reláció Dirac-kúp jellege nem változik, csak a sebesség numerikus értéke módosul kissé.

Végül, könnyen kiszámolhatjuk a Dirac-pont közelében a $\varrho(E) = \sum_{\mathbf{k},s} \delta(E - E_s(\mathbf{k}))$ állapotsűrűséget is a (3.8a)-ben számolt $E_s(\mathbf{k})$ diszperziós reláció alapján, és az $A_c = \sqrt{3}a^2/2$ elemi cellára vonatkoztatva kapjuk:

$$\varrho(E) = \frac{2}{\pi^2} \frac{A_c}{\hbar^2 v^2} |E|, \quad (3.19)$$

ahol egy 2-es szorzóval vettük figyelembe az elektron spinjei szerinti degenerációt, illetve egy további 2-es szorzót jelent a \mathbf{K} és \mathbf{K}' degeneráció. Fontos megjegyezni, hogy ez az állapotsűrűség eltér a jól ismert kétdimenziós nemrelativisztikus elektrongáz konstans állapotsűrűségétől.

3.1.3. Királis alagutazás, a Klein-paradoxon

Ebben a részben a királis Dirac-fermion kétdimenziós potenciállépcsőn történő szórását vizsgáljuk.

A relativisztikus Dirac-egyenlet alapján Klein mutatta meg először, hogy az elektron T transzmissziós valószínűsége csak gyengén függ a potenciálgát V_0 magasságától, ha értéke nagyobb az elektron mc^2 nyugalmi energiájának 2-szeresénél [180]. Sőt végteleen nagy V_0 esetén is elérheti a tökéletes transzmissziót, azaz a $T = 1$ értéket. Ez szöges ellentétben van a nemrelativisztikus Schrödinger-egyenletből kapott eredménnyel, ahol T exponenciálisan csökken V_0 növekedésével. Ezt a „józan észnek” ellentmondó eredményt *Klein-paradoxon*nak nevezik [180,181]. Ugyanakkor, kísérletileg nehéz kimutatni a jelenséget, mert a potenciálváltozásnak nagyobbak kell lennie $2mc^2$ -nél a $\hbar/(mc)$ Compton-hullámhossz nagyságrendjébe eső távolságon, ami óriási elektromos teret jelent ($\mathcal{E} > 10^{16}$ V/cm).

Szén nanocsöveknél először Ando, Nakanishi és Saito fedezte fel a tökéletes transzmisszió lehetőségét [178]. Grafénben, először Katsnelson, Novoselov és Geim mutatták meg a Klein-paradoxon létezését [182]. Mivel a v sebesség jóval kisebb a fénysebességnél, egy realiztikus méretű grafén mintában is könnyen megvalósítható a szükséges nagyságú elektromos tér ($\mathcal{E} > 10^5$ V/cm), és így a Klein-paradoxon kimutatható kísérletileg. Áttételesen a Klein-paradoxon befolyásolja a transzport-tulajdonságokat is, ezért a jelenség megértése mind elméleti, mind kísérleti szempontból rendkívül fontos. A továbbiakban ismertetjük a jelenség lényegét.

Síkhullám megoldást feltételezve, egyszerű számolással belátható, hogy a (3.17)-ben definiált H_+ operátornak a (3.8a) egyenletben adott $E_s(\mathbf{k})$ sajátértékeihez tartozó

sajátfüggvényei a \mathbf{K} pont közelében:

$$\psi_{s,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_{\mathbf{k}}/2} \\ se^{i\theta_{\mathbf{k}}/2} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \text{ ahol } \theta_{\mathbf{k}} = \arctg \frac{k_y}{k_x}. \quad (3.20)$$

A fenti hullámfüggvényt gyakran *kvázirészecske állapotnak* is nevezik. A hullámfüggvény a \mathbf{K}' pont közelében megegyezik a fenti hullámfüggvény időtükrözöttjével, azaz, ha végrehajtjuk a $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ transzformációt.

Vegyük észre, hogy ha a θ szög elfordul 2π szöget, akkor a hullámfüggvény előjele megváltozik, ami egy extra π fázist jelent. A hullámfüggvénynek ez a tulajdonsága a spinor jellegére utal (az irodalomban Berry-fázisnak nevezik).

A hullámfüggvény jellemezhető a *helicitásával*, ami az impulzus-operátor vetülete a $\boldsymbol{\sigma}$ pszeudospin irányra. A helicitás-operátor alakja

$$\hat{\mathbf{h}} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\hat{\mathbf{p}}}{|\hat{\mathbf{p}}|}, \quad (3.21)$$

és a definícióból világos, hogy a (3.20) egyenlettel adott $\psi_{s,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ energia-sajátfüggvény egyben sajátfüggvénye a helicitás-operátornak is $s = \pm 1$ sajátértékkel:

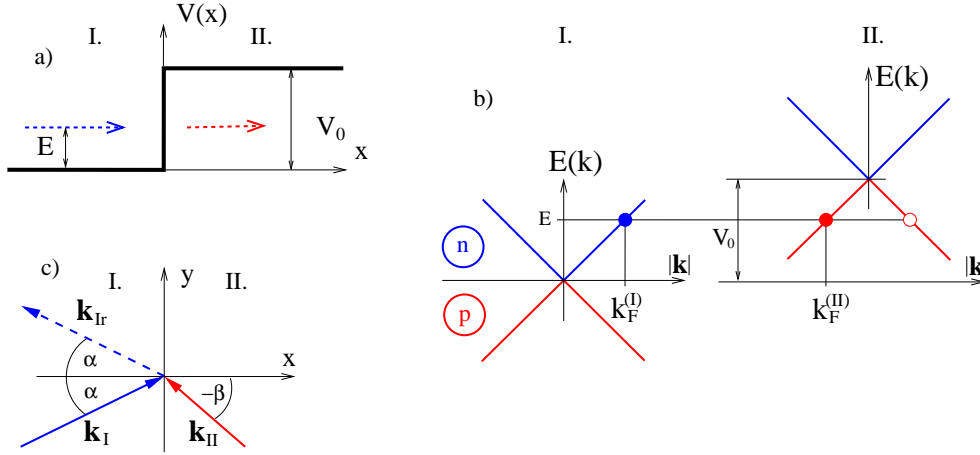
$$\hat{\mathbf{h}}\psi_{s,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = s\psi_{s,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (3.22)$$

A (3.22) egyenlet szerint a $\boldsymbol{\sigma}$ operátor két sajátértékéhez tartozó várhatóértékének az iránya vagy megegyezik a \mathbf{p} irányával, vagy azzal ellentétes irányú. A helicitás vagy másnéven *kiralitás* jól meghatározott kvantumszám, amíg a rendszer Hamilton-operátora leírható a (3.17) által adott H_+ Dirac-Hamilton-operátorral. Megjegyezzük, hogy a kiralitás nem az elektron spinjével kapcsolatos (amint láttuk, az elektron spinje közvetlenül nem is szerepel a problémában), hanem a $\boldsymbol{\sigma}$ pszeudospinnel, ami a $\psi_{s,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ hullámfüggvény kétkomponensű jellegével van összefüggésben.

A továbbiakban megvizsgáljuk, hogy hogyan szóródik az elektron egy potenciál-lépcsőn. Az irodalomban ezt gyakran $p - n$ átmenetnek is nevezik. Feltesszük, hogy az elektron $p - n$ átmeneten történő áthaladáskor nem lép fel a \mathbf{K} és \mathbf{K}' pontok közti szórási folyamat, azaz a rendszer leírható a (3.17) egyenlettel adott $H_{\text{grafén}}$ Hamilton-operátorral. Feltesszük továbbá, hogy a grafén tetejére helyezett kapukkal (vagy kémiai dópolással) megváltoztatjuk az elektronok energiáját a grafénben úgy, hogy a potenciál $V(x) = 0$, az $x < 0$ féltérben (I. tartomány), és $V(x) = V_0$, az $x \geq 0$ féltérben (II. tartomány), ahol V_0 egy konstans, pozitív érték (lásd a 3.4 a ábrát). A p-n átmenet Hamilton-operátora a \mathbf{K} pontra a (3.17) alapján:

$$H_{p-n} = H_+ + V(x) = v\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}} + V(x). \quad (3.23)$$

Az II. tartományban a Dirac-kúp V_0 értékkel megemelkedik, ahogy ez a 3.4 b ábrán látható. A potenciál nem függ az y koordinátától, a rendszer transláció-invariáns az y irányban, és így az elektron y irányú impulzusa megmarad. Legyen az I. tartományból balról érkező elektron energiája $E < V_0$, és haladjon α szögben a határfelület normálisához képest (lásd a 3.4 c ábrát)! Ekkor a hullámszámvektora $\mathbf{k}_I = k_F^{(I)}(\cos \alpha, \sin \alpha)$, ahol $k_F^{(I)} = E/(\hbar v)$. A bejövő hullám egy része visszaverődik. A reflektált kvázirészecske hullámszámvektora $\mathbf{k}_{Ir} = k_F^{(I)}(-\cos \alpha, \sin \alpha)$, ahogy ez a 3.4 b



3.4. ábra. A $p - n$ átmenet leírása. a) Az E energiájú elektron balról, az I. tartományból érkezik a határfelületre, és átmegy a $V(x)$ potenciállépcsőn a II. tartományba. b) A II. tartományban a Dirac-kúp V_0 értékkel megemelkedik az I. tartományhoz képest. Az elektron-szerű állapot (a teli kék karika) átalakul lyuk-szerű állapottá (a teli piros karika, melynél a csoportsebesség x komponense pozitív). c) Az elektron a határfelület normálisához képest α szögben érkezik (folytonos kék vonal), és ezután egyrészt elektronként reflektálódik (szaggatott kék vonal), másrészt lyukként halad tovább a II. tartományban (folytonos piros vonal), ahol az impulzusának x komponense negatív.

ábrán látható.

A potenciállépcsőn való áthaladás után a kvázirészecske E energiája kisebb a V_0 potenciálnál. A II. tartományban a lyuksáv két állapota (a 3.4 b ábrán az üres és teli piros karika) közül csak az egyiket töltheti be. Az I. tartományból bejövő kvázirészecske helicitása $+1$ (mivel $s = 1$), a II. tartományban pedig -1 (mivel $s = -1$). A potenciállépcsőn való áthaladás után a σ pszeudospin megmarad (például elektrosztatikus potenciál esetében), ezért az impulzus x komponensének előjelet kell váltania. A lyuksávban a két lehetséges állapot közül a teli piros karikával jelzett állapotba szóródhat az elektron a $p - n$ átmeneten való áthaladáskor. Ez azt jelenti, hogy a II. tartományban a lyuk impulzusának x komponense negatív lesz, de az y komponense változatlan marad az ebben az irányban érvényes impulzuszórtómaradás miatt. Az impulzusnak ezt a furcsa viselkedését megérthetjük úgy is, hogy II. tartományban a részecske csoportsebességének pozitívnak kell lennie, ha a határfelülettől jobbra távolodó hullámcsomagot vizsgálunk. Így a diszperziós reláció miatt a lyuk impulzusának x komponense negatív lesz.

Másképpen szólva, a kvázirészecske hullámcsomagja a II. tartományban — az optikában megszokottól eltérően — *negatív* szögben törik meg. A továbbiakban $\beta < 0$ konvenciót vesszük. Így írhatjuk, hogy $\mathbf{k}_{II} = k_F^{(II)}(\cos(\pi + \beta), \sin(\pi + \beta))$, ahol $k_F^{(II)} = |E - V_0|/(\hbar v)$. Mivel a bejövő és az átmenő kvázirészecske hullámszámvektorának y komponense változatlan, adódik:

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} \equiv n = -\frac{k_F^{(II)}}{k_F^{(I)}} = -\frac{|E - V_0|}{E}. \quad (3.24)$$

Ez nem más, mint a Snellius–Descartes-féle törési törvény, csak a *törésmutató negatív*.

Grafénben az elektronnak erre a különös viselkedésére először Cheianov, Fal'ko és Altshuler hívták fel a figyelmet [183]. A 3.2 fejezetben további példát mutatunk a negatív törésmutatójú rendszerek elektron-optikai viselkedésére.

Összefoglalva, a 3.4 c ábrán látható kvázirészecske hullámszámvektorok (az I. tartományban a bejövő és reflektált, illetve a II. tartományban az átmenő) a következő alakba írhatók:

$$\mathbf{k}_I = k_F^{(I)}(\cos \alpha, \sin \alpha), \quad (3.25a)$$

$$\mathbf{k}_{Ir} = k_F^{(I)}(\cos(\pi - \alpha), \sin(\pi - \alpha)), \quad (3.25b)$$

$$\mathbf{k}_{II} = k_F^{(II)}(\cos(\pi + \beta), \sin(\pi + \beta)), \text{ ahol} \quad (3.25c)$$

$$k_F^{(I)} = E/(\hbar v), \quad (3.25d)$$

$$k_F^{(II)} = |E - V_0|/(\hbar v). \quad (3.25e)$$

Nyilvánvaló, hogy a (3.20) által adott sajátfüggvény a (3.23)-nek is sajátfüggvénye, és így a fenti hullámszámvektorokat felhasználva az I. és II. tartományban a hullámfüggvény a következő alakba írható:

$$\psi_I = \psi_{be} + \psi_{refl}, \text{ ahol} \quad (3.26a)$$

$$\psi_{be} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} \\ e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} e^{ik_F^{(I)}(x \cos \alpha + y \sin \alpha)}, \quad (3.26b)$$

$$\psi_{refl} = r \begin{pmatrix} e^{-i(\pi-\alpha)/2} \\ e^{i(\pi-\alpha)/2} \end{pmatrix} e^{ik_F^{(I)}(-x \cos \alpha + y \sin \alpha)}, \text{ és} \quad (3.26c)$$

$$\psi_{II} = \psi_{trans} = t \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i(\pi+\beta)/2} \\ -e^{i(\pi+\beta)/2} \end{pmatrix} e^{ik_F^{(II)}(-x \cos \beta - y \sin \beta)}, \quad (3.26d)$$

ahol r és t a reflexiós és transzmissziós amplitúdó, melyeket a határfeltételekből lehet meghatározni. A fenti összefüggésekben a ψ_I hullámfüggvény első tagja a bejövő, a második tagja a reflektált, míg a ψ_{II} az áthaladó állapotot írja le.

A (3.23) alapján a $H_{p-n}\psi = E\psi$ Dirac-egyenletre elegendő a hullámfüggvényeket illeszteni a határon. Ennek oka, hogy a Dirac-egyenletben csak a hullámfüggvény első deriváltja szerepel, ellentétben a Schrödinger-egyenlettel, ahol fellép a második derivált is, és így a deriváltak illesztésére szintén szükség van. Így a Dirac-egyenletre p-n átmenet esetén a határfeltétel:

$$\psi_I|_{x=0} = \psi_{II}|_{x=0}. \quad (3.27)$$

Ez két független egyenletet jelent az ismeretlen r és t amplitúdókra.

A T transzmissziós és az R reflexiós valószínűségek az áramokkal számolhatók ki, melyek az áramoperátor megfelelő állapotokra vett várhatóértékei. Az áramoperátor a (3.23) által adott H_{p-n} Hamilton-operátor esetén:

$$\hat{\mathbf{j}} = i \frac{e}{\hbar} [H_{p-n}, \mathbf{r}] = ev\boldsymbol{\sigma}. \quad (3.28)$$

Így az áramoperátor x komponensének várhatóértéke a ψ_{be} , ψ_{refl} , illetve ψ_{trans} állapo-

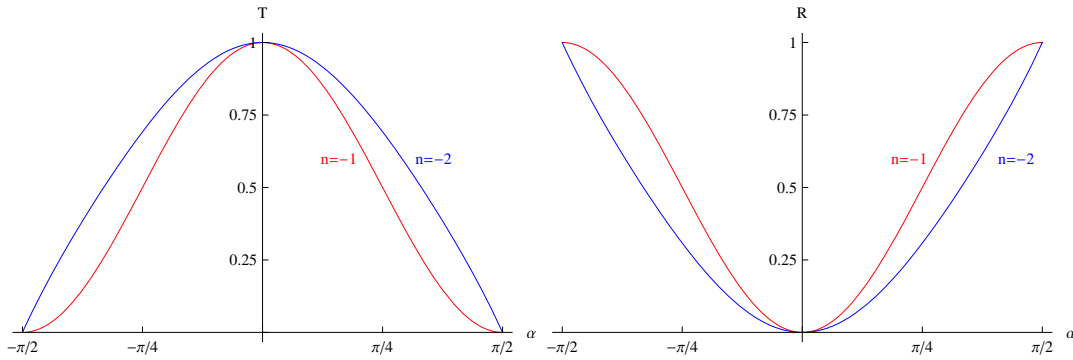
tokra: $j_{\text{be}} = \langle \psi_{\text{be}} | \hat{\mathbf{j}}_x | \psi_{\text{be}} \rangle$, $j_{\text{refl}} = \langle \psi_{\text{refl}} | \hat{\mathbf{j}}_x | \psi_{\text{refl}} \rangle$ és $j_{\text{trans}} = \langle \psi_{\text{trans}} | \hat{\mathbf{j}}_x | \psi_{\text{trans}} \rangle$. Végül a fentiek alapján, egyszerű számolással a következő eredményt kapjuk a potenciállépcsőn áthaladó elektron esetén a T transzmissziós és az R reflexiós valószínűségeknek az α beesési szögtől való függésére:

$$T = \frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{be}}} = \frac{\cos \beta}{\cos \alpha} |t|^2 = \frac{\cos \alpha \cos \beta}{\cos^2 \frac{\alpha+\beta}{2}}, \quad (3.29a)$$

$$R = \frac{|j_{\text{refl}}|}{j_{\text{be}}} = |r|^2 = \frac{\sin^2 \frac{\alpha-\beta}{2}}{\cos^2 \frac{\alpha+\beta}{2}}, \quad (3.29b)$$

és a β szöget a (3.24) Snellius–Descartes-féle törési törvény határozza meg.

Könnyen belátható, hogy az $R+T=1$ egyenlőség teljesül, ami az árammegmaradást fejezi ki. A 3.5 ábra mutatja a T transzmisszió és R reflexiós valószínűségeket két törésmutató esetén, melyet a (3.24) egyenlet szerint adott V_0 potenciál mellett a bejövő elektron E energiája határoz meg. Az ábrából és a fenti összefüggésből jól látható,



3.5. ábra. A T transzmisszió (bal oldali ábra) és az R reflexiós (jobb oldali ábra) valószínűség az α beesési szög függvényében $n = -1$, illetve $n = -2$ esetén.

hogy a $T(\alpha)$ transzmissziós valószínűség páros függvénye α -nak, és a határfelületre merőleges beesésnél ($\alpha = 0$) az elektron transzmissziója tökéletes ($T = 1$), és független a V_0 potenciáltól. A fenti formulákat tulajdonképpen tekinthetjük az elektron-optika *Fresnel-formuláinak* grafénben.

A fentiek alapján könnyen általánosíthatjuk a problémát arra az esetre, amikor az elektron nem egy potenciállépcsőn, hanem egy potenciálgáton halad át. Az előzőekhez hasonlóan, viszonylag egyszerűen kiszámolhatjuk a T transzmissziós valószínűséget egy olyan potenciálgátra, melyre $V(x) = V_0$, ha $|x| \leq D/2$, különben pedig zérus. A számolást először Katsnelson, Novoselov és Geim végezték el [182], és a következőt kapták:

$$T = \frac{\cos^2 \alpha \cos^2 \beta}{\cos^2(Dq) \cos^2 \alpha \cos^2 \beta + \sin^2(Dq) (1 + \sin \alpha \sin \beta)^2}, \quad (3.30)$$

ahol $q = k_F^{(II)} \sqrt{1 - \sin^2 \alpha / n^2}$. Látható, hogy merőleges beesésnél ismét tökéletes a transzmisszió, az elektron visszaszóródás nélkül áthalad tetszőleges magasságú potenciálgáton. Ezt, az elsőnek meglepő, eredményt nevezik Klein-paradoxonnak. Ilyen jelenség nem fordulhat elő nemrelativisztikus elektron esetén, ilyenkor a transzmisszió

valószínűsége exponenciálisan csökken a V_0 potenciállal. Ha $\alpha \neq 0$, akkor a T transzmissziós valószínűség már függ a V_0 potenciáltól, és $T < 1$. További részletek Katsnelson, Novoselov és Geim munkájában találhatók [182].

A későbbiekben Cheianov és Fal'ko tanulmányozták a változó magasságú potenciálgáton keresztül történő transzmissziót [184]. Kimutatták, hogy a d hosszúságskálán változó potenciálgát esetében a k_F hullámszámú, $\theta \ll 1$ szögben érkező elektron transzmissziós valószínűsége:

$$T(\theta) = e^{-\pi(k_F d) \sin^2 \theta}. \quad (3.31)$$

Látható, hogy a transzmisszió szelektív, nagy valószínűséggel csak a határfelületre merőlegesen beeső elektronok jutnak át a potenciálgáton. Ez az eredmény fontos lehet a jövőben a grafén alapú elektron-optikai eszközök tervezésében.

3.1.4. Dirac-fermion mágneses térben, anomális kvantum Hall-effektus

A grafén síkjára merőleges irányú \mathbf{B} homogén mágneses térben a Dirac-Hamilton-operátor alacsony energiás közelítésben a (3.17) alapján a következő alakú:

$$H_{\pm} = v(\sigma_x \pi_x \pm \sigma_y \pi_y), \quad (3.32)$$

ahol a $+$ ($-$) indexek \mathbf{K} (\mathbf{K}') pontoknak felelnek meg, míg a kinetikus impulzus a szokásos módon a $\boldsymbol{\pi} = (\pi_x, \pi_y) = \mathbf{p} - e\mathbf{A}$, ahol \mathbf{p} a kanonikus impulzus és \mathbf{A} a vektorpotenciál, melyet a $\mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A}$ egyenlet határoz meg. A Hamilton-operátor \mathbf{K} és \mathbf{K}' pontok szerint degenerált, azaz tetszőleges mágneses térre (inhomogén térben is) $\sigma_x H_{\pm} \sigma_x = H_{\mp}$, és így elegendő csak egy \mathbf{K} pont körül vizsgálni a rendszert.

A H_+ Dirac-Hamilton-operátor spektruma a $H_+ \Psi(x, y) = E \Psi(x, y)$ egyenletből kapható (lásd pl. [185, 186]). A számítások szerint az E_n Landau-nívók:

$$E_n = \text{sgn}(n) \hbar \omega_c \sqrt{|n|}, \quad (3.33)$$

ahol $\omega_c = \sqrt{2}v/l$ a ciklotron frekvencia, $l = \sqrt{\hbar/|eB|}$ a mágneses hossz, $n = 0, \pm 1, \dots$, és $\text{sgn}(\cdot)$ az előjelfüggvény. Hasonló eredményt ad a \mathbf{K}' pont körüli H_- operátor spektruma. A degenerációkat is figyelembe véve, azt kapjuk, hogy minden Landau-nívó 4-szeresen elfajult (2-es faktor a spin, 2-es faktor a \mathbf{K} és \mathbf{K}' pontok szerint degeneráció miatt), kivéve az $n = 0$ állapothoz tartozó $E = 0$ energiájú szintet, mely csak a spin szerint degenerált.

A kísérletileg megfigyelt kvantum Hall-effektus grafénben [157, 158] megérthető a fenti Landau-nívók degenerációja alapján. A hagyományos kvantum Hall-effektushoz hasonlóan [187, 188] minden betöltött Landau-nívóhoz tartozó állapot $G_0 = e^2/h$ vezetőképesség-kvantumnyit járul a minta teljes vezetőképességéhez. Az $E = 0$ zérus mód miatt $2 \times (2N + 1)$ betöltött állapot van E_N energiaszint alatt (N pozitív vagy negatív egész), és így

$$\sigma_{xy} = 2 \times (2N + 1) G_0 = \left(N + \frac{1}{2}\right) \frac{4e^2}{h}. \quad (3.34)$$

A tranzverzális vezetőképesség kvantált, a $4G_0$ vezetőképesség-kvantum *félegész* számú többszöröse, ellentétben a nemrelativisztikus kétdimenziós elektrongáz esetével, ahol a vezetőképesség *egész* számú többszöröse $2G_0$ -nak. Ezért nevezik a jelenséget *anomális Hall-effektusnak*. A mágneses tér függvényében mért vezetőképesség-platók szekvenciája, kísérletileg egyértelműen kimutatható módon, eltér a nemrelativisztikus esetben mért platók szekvenciájától. Fontos megjegyezni, hogy az anomális Hall-effektus szobahőmérsékleten is megfigyelhető. Ez azzal magyarázható, hogy például $B \approx 10$ T mágneses térnél a szomszédos Landau-nívók közti különbség 1000 K, ellentétben a nemrelativisztikus esethez, ahol ez az érték néhány K. Hasonlón, a Zeeman-felhasadás nagyon kicsi, $g\mu_B B \approx 5$ K, és így elhanyagolható. Az elektronok közti Coulomb-kölcsönhatás szerepét pl. Ezawa vizsgálta [186], és számításai szerint a kölcsönhatás további felhasadásokat eredményez. Geim [157] és Kim [158] csoportja által mért anomális Hall-effektus volt az első bizonyíték arra, hogy grafénben az elektron dinamikáját a Dirac-egyenlet határozza meg.

3.1.5. Minimális vezetőképesség

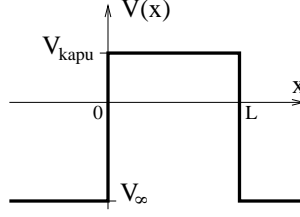
Az előzőekben taglalt szokatlan transzport-tulajdonságok mellett egy másik fontos kísérleti tény az ún. *minimális vezetőképesség* [157, 158]. A mérések szerint ha változtatjuk a töltéshordozók ϵ energiáját például kapufeszültséggel vagy a töltéshordozók számának változtatásával, akkor grafénben a fajlagos vezetőképesség minimális értéket vesz fel az $\epsilon = 0$ Fermi-energiánál. Meglepő módon elméletileg sokkal korábban, a grafén felfedezése előtt már tanulmányozták a minimális vezetőképességet a Dirac-fermion kapcsán [189]. De a fenti kísérleti eredmények óta még több cikk foglalkozik a minimális vezetőképességgel, és e^2/h nagyságrendű értéket jósoltak [190–199]. Nemrégén Miao és munkatársai [200], illetve Danneau és munkatársai [201] kísérletileg igazolták, hogy egy W szélességű és L hosszúságú egyrétegű grafénben a minimális vezetőképesség $\sigma_{\min} = (4/\pi) e^2/h$ univerzális értékhez tart a W/L növelésével (széles, de rövid mintákra), és ez legtöbb elméleti eredménnyel megegyezik [193, 195–199, A19].

Ebben a részben kiszámoljuk a minimális vezetőképességet a Landauer-formula alapján, melyet először Tworzydło és munkatársai vizsgáltak ezzel a módszerrel [198]. A számolás sokban hasonlít a 3.1.3 fejezetben tárgyalt Klein-paradoxon problémájához, a legfontosabb különbség, hogy itt a minta keresztirányú (y irányú) mérete véges. Ezért, illetve a meglepő eredmény miatt, érdemes bemutatni részletesebben is a számolást. A következőkben kissé módosítva Tworzydło és munkatársainak a számolását követjük.

Tekintsük a 3.1 ábrán látható elrendezést! A jobb és bal oldali kontaktusokat úgy lehet modellezni, hogy a grafénnek ezen részein a potenciált nagy negatív V_∞ értékre állítjuk. Így, itt az M nyitott csatornák száma (a definíciót lásd később) tart a végtelenhez, ha $V_\infty \rightarrow -\infty$, ami a kontaktusok fémes jellegét modellezi. Az $\epsilon = 0$ Fermi-energiájú elektronok a bal oldali kontaktusból lépnek be a mintában, ahol a kapufeszültséget V_{kapu} értékre állítjuk, majd a jobb oldali kontaktuson távoznak. A 3.1 ábrán látható mintán a potenciál változás $V(x)$, mely a 3.6 ábrán látható. Feltesszük, hogy a potenciál a minta keresztirányában konstans, azaz nem függ y -től.

A σ fajlagos vezetőképesség a Landauer-formula alapján a G konduktanciából határozható meg:

$$G = \sigma \frac{W}{L} = \frac{4e^2}{h} \text{Tr}(\mathbf{tt}^+) = \frac{4e^2}{h} \sum_n T_n, \quad (3.35)$$



3.6. ábra. A 3.1 ábrán látható grafénre kapcsolt $V(x)$ potenciál függése. A kontaktusokon a potenciál V_∞ , míg a mintára V_{kapu} kapufeszültséget kapcsolunk. A potenciál nem függ az y iránytól.

ahol a 4-es faktor a spin, illetve a \mathbf{K} és \mathbf{K}' Dirac-pontok degenerációjából származik, T_n a $\mathbf{t}\mathbf{t}^+$ mátrix sajátértékei, és \mathbf{t} a transzmissziós amplitúdó, melyet például a kontaktusokban és a mintában lévő hullámfüggvények illesztéséből számolhatunk ki. Ennek érdekében határozzuk meg a hullámfüggvényeket az elrendezés különböző tartományaiban!

A rendszert leíró Hamilton-operátor a \mathbf{K} pontra a (3.17) alapján a következő alakú: $H_{\text{strip}} = H_+ + eV(x) = v(\sigma_x p_x + \sigma_y p_y) + eV(x)$, ahol e az elektron töltése és $V(x)$ a mintára kapcsolt potenciál. A $H_{\text{strip}}\psi = E\psi$ Schrödinger-egyenlet sajátfüggvényei megegyeznek a (3.20) sajátfüggvényekkel, és az elrendezés három tartományában a hullámfüggvények ezekből konstruálhatók:

$$\psi(x, y) = \begin{cases} \chi_{n,k}(y) e^{ikx} + r_n \chi_{n,-k}(y) e^{-ikx}, & \text{ha } x < 0, \\ \alpha_n \chi_{n,\tilde{k}}(y) e^{i\tilde{k}x} + \beta_n \chi_{n,-\tilde{k}}(y) e^{-i\tilde{k}x}, & \text{ha } 0 < x < L, \\ t_n \chi_{n,k}(y) e^{ik(x-L)}, & \text{ha } x > L, \end{cases} \quad (3.36a)$$

ahol

$$\chi_{n,\pm k}(y) = \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} e^{iq_n y}, \quad (3.36b)$$

$$\chi_{n,\tilde{k}}(y) = \begin{pmatrix} 1 \\ s e^{i\Phi_n} \end{pmatrix} e^{iq_n y}, \quad (3.36c)$$

$$\chi_{n,-\tilde{k}}(y) = \begin{pmatrix} 1 \\ s e^{i(\pi-\Phi_n)} \end{pmatrix} e^{iq_n y}, \quad \text{és } s = \text{sgn}(V_{\text{kapu}}). \quad (3.36d)$$

A fenti egyenletekben a paraméterek a következő módon határozhatók meg. Keresztirányban a Hamilton-operátor nem függ az y koordinátától, így mind a három tartományban a hullámfüggvény tartalmaz egy $e^{iq_n y}$ függést. A keresztirányú q_n hullámszámvektort az y irányú határfeltételekből határozhatjuk meg [198, 202]. A különböző típusú szélek esetében $q_n = \frac{\pi}{W}(n + \alpha)$, ahol $0 \leq \alpha < 1$ a grafén szélének jellegétől függ. Látni fogjuk, hogy $W/L \rightarrow \infty$ esetén α értéke irreleváns. Az $\epsilon = 0$ Fermi-energiájú elektronra az $x < 0$, illetve $x > L$ tartományban a k longitudinális hullámszámvektort az $eV_\infty \pm \hbar v \sqrt{k^2 + q_n^2} = 0$ egyenletből kaphatjuk meg. A nyitott csatornák száma⁴ $M = [(k_\infty W/\pi + \alpha)]$, ahol $k_\infty = e|V_\infty|/(\hbar v)$ és $[\cdot]$ az egészrészt

⁴A nyitott csatornák számát az határozza meg, hogy milyen q_n -nél válik a k longitudinális hullámszámvektor zérussá.

jelöli. Így a keresztmódusok $n = 1, 2, \dots, M$ jellemezhetők. Látható, hogy ha $V_\infty \rightarrow -\infty$, akkor $M \rightarrow \infty$, azaz ekkor a kontaktusok fémek jellegűek. A kontaktusokban a (3.36b) egyenletben szereplő spinorkomponenseket a következő módon számolhatjuk ki. Mivel $V_\infty \rightarrow -\infty$ igaz, hogy a pozitív x irányban haladó síkhullámra $k \gg q_n$, és így a (3.20) egyenletben a $\theta_{\mathbf{k}}$ szög zérushoz tart, azaz a spinorkomponens $(e^{-i\theta_{\mathbf{k}}/2}, e^{i\theta_{\mathbf{k}}/2})^+ \sim (1, e^{i\theta_{\mathbf{k}}})^+ \rightarrow (1, 1)^+$ értékhez tart (egy lényegtelen fázisszorzó erejéig). Ugyanakkor a $-x$ irányban haladó síkhullámra $\theta_{\mathbf{k}} \rightarrow \pi$, és így a spinorkomponens a $(1, -1)^+$ értékhez tart. Hasonlóan, a $0 < x < L$ részben a \tilde{k} longitudinális hullám-számvektor az $eV_{\text{kapu}} \pm \hbar v \sqrt{\tilde{k}^2 + q_n^2} = 0$ egyenletből számolható. Egyszerűen kapjuk, hogy adott n keresztmódusra $\tilde{k}_n = \sqrt{q_n^2 - \kappa^2}$, ha $q_n > \kappa$, és $\tilde{k}_n = i\sqrt{\kappa^2 - q_n^2}$, ha $q_n < \kappa$, ahol $\kappa = e|V_{\text{kapu}}|/(\hbar v)$. A (3.36c) és (3.36d) egyenletekben szereplő spinorkomponensek a (3.20) egyenletnek megfelelően⁵ a $\text{tg } \Phi_n = q_n/\tilde{k}_n$ összefüggésből számolható. Végül a bal oldali kontaktusnál (az $x < 0$ tartományban) a (3.36a) hullámfüggvényben az r_n reflexiós amplitúdót, a jobb oldali kontaktusnál (az $x > L$ tartományban) a t_n transzmissziós amplitúdót, és az α_n , illetve β_n együtthatókat a határfeltételekből számolhatjuk ki. Mint korábban láttuk, a Dirac-egyenletnél elég a hullámfüggvényeket illeszteni az $x = 0$, illetve $x = L$ határokon. A két határfeltétel a kétkomponensű spinorokra négy egyenletet jelent a négy ismeretlen r_n , t_n , α_n és β_n amplitúdókra. Mivel a hullámfüggvény y koordinátától való függése azonos a három tartományban, a módusok nem keverednek, azaz a \mathbf{t} transzmissziós amplitúdó-mátrix diagonális t_n diagonális elemekkel.

A fentiek alapján a határfeltételek az $x = 0$, illetve $x = L$ határokon:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + r_n \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \alpha_n \begin{pmatrix} 1 \\ s e^{i\Phi_n} \end{pmatrix} + \beta_n \begin{pmatrix} 1 \\ s e^{i(\pi-\Phi_n)} \end{pmatrix}, \quad (3.37a)$$

$$t_n \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \alpha_n \begin{pmatrix} 1 \\ s e^{i\Phi_n} \end{pmatrix} e^{i\tilde{k}_n L} + \beta_n \begin{pmatrix} 1 \\ s e^{i(\pi-\Phi_n)} \end{pmatrix} e^{-i\tilde{k}_n L}. \quad (3.37b)$$

Az egyenletrendszert megoldva a $T_n = |t_n|^2$ transzmissziós valószínűséget kapjuk:

$$T_n = \frac{1}{\cos^2 \tilde{k}_n L + \frac{\sin^2 \tilde{k}_n L}{\cos^2 \Phi_n}} = \frac{1}{\cos^2 \tilde{k}_n L + \frac{\kappa^2}{\tilde{k}_n^2} \sin^2 \tilde{k}_n L}. \quad (3.38)$$

Ha \tilde{k}_n tisztán képzetes, akkor a fenti képletben a két trigonometrikus függvény helyett a megfelelő hiperbolikus függvényeket kell venni, azaz a $\cos \rightarrow \text{ch}$, illetve $\sin \rightarrow \text{sh}$ cserét kell elvégezni. Megjegyezzük, hogy a végeredményből kiesett az s paraméter, azaz T_n páros függvénye a V_{kapu} kapufeszültségnek.

Különleges esetnek számít, ha a Dirac-pontban vagyunk, azaz amikor $V_{\text{kapu}} = 0$. Ekkor $\tilde{k}_n = iq_n$ tisztán képzetes. A transzmittáló módusok evanescens (exponenciálisan lecsengő) hullámok. Ekkor a fenti egyenlet szerint a transzmissziós valószínűség:

$$T_n = \frac{1}{\text{ch}^2 q_n L} = \frac{1}{\text{ch}^2 [(n + \alpha) \pi L / W]}, \quad (3.39)$$

⁵Vegyük észre, hogy ebben a tartományban az elektron a lyuksávban van, ha $V_{\text{kapu}} > 0$, ezért $s = -1$, és a részecskesávban, ha $V_{\text{kapu}} < 0$, azaz $s = 1$.

és a (3.35) egyenletből a fajlagos vezetőképesség:

$$\sigma = \frac{4e^2}{h} \frac{L}{W} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\text{ch}^2[(n+\alpha)\pi L/W]}. \quad (3.40)$$

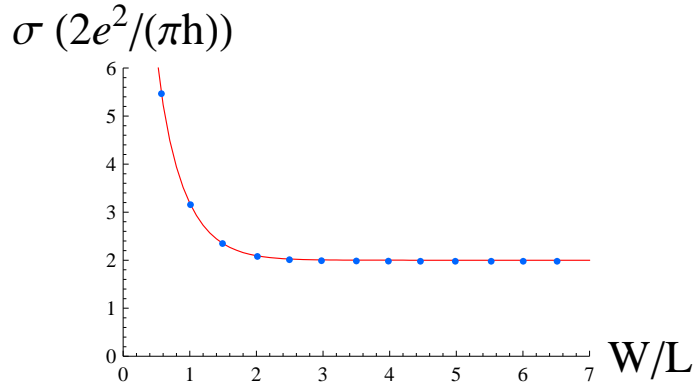
A $W/L \rightarrow \infty$ határesetben bevezethetjük az $x = (n+\alpha)\pi \frac{L}{W}$ változót, és az n szerinti összegzésről áttérhetünk az x szerinti integrálásra. Így a fajlagos vezetőképességre a következő univerzális érték adódik:

$$\sigma = \frac{4e^2}{\pi h} \int_0^{\infty} \frac{dx}{\text{ch}^2 x} = \frac{4}{\pi} \frac{e^2}{h} \quad (3.41)$$

Látható, hogy az eredmény nem függ az α paramétertől, ha $W/L \rightarrow \infty$.

Tworzydło és munkatársai numerikusan is elvégezték a számolást [198], de a részleteket nem közölték. Ezért Visontai Dávid, volt diplomamunkásom, szakdolgozatának keretében megismételte a számolást [203]. A numerikus számolás a szoros kötésű közelítésben (tight-binding approximation) történt, a Dirac-egyenlet felhasználása nélkül. Így a számolás független ellenőrzésnek tekinthető. Ez a módszer a rekurzív Green-függvény technikán alapul, melyet az elmúlt években számos fizikai rendszerre alkalmazott az a lancasteri csoport, mellyel több éves együttműködésem van, illetve korábbi PhD hallgatóm, Koltai János is [204].

A σ fajlagos vezetőképesség W/L aránytól való függése a 3.7 ábrán látható. Látható, hogy a fajlagos vezetőképességre kapott elméleti eredmény kitűnően egyezik



3.7. ábra. A fajlagos vezetőképesség függése a W/L aránytól. A folytonos görbe a (3.40) elméleti, a pöttyök a numerikus számolásból kapott eredmények. Itt $\alpha = 0$.

a numerikus számolásból nyert eredménnyel minden W/L arány mellett. Nagy W/L értékre a fajlagos vezetőképesség a fent kapott univerzális értékhez tart. Az első mérésekben [157] a fajlagos vezetőképesség kb. egy 3-as faktossal volt nagyobb a fent vázolt, illetve más elméleti számolásból nyert univerzális értéknél [193, 195–199, A19]. Ez a rejtélyes eltérés valószínűleg amiatt tapasztalható, hogy a W/L arány nem volt elegendően nagy. Ezt a feltételezést látszanak igazolni a legutóbbi mérések [200, 201], melyekben különböző W/L arány mellett mérték a fajlagos vezetőképességet, és jó egyezést kaptak a (3.40) elméleti eredménnyel. Később, Visontai Dávid munkájában szereplő számolásokat ki szeretnénk terjesztetni kétrétegű grafén mintára is.

3.2. Elektron-optika grafénben

A fejezet további részében a [A20] cikkben közölt eredményeinket foglaljuk össze.

Grafénben az elektron-optikai tulajdonságok lényegében a 3.1.3 bevezető részben tárgyalt alapelvekre építhetők. Megmutattuk, hogy grafénben az elektronok reflexiója, illetve transzmissziója a negatív törésmutató bevezetésével értelmezhető. A természetben a negatív törésmutató lehetőségét először Veselago [205] vetette fel elméletileg, melyet számos fontos cikk követett [206]. Később sikerült mesterségesen előállítani olyan dielektromos anyagokat, illetve ún. *fotonikus kristályokat*, melyekben a törésmutató negatív [207]. A fotonikus kristályokról egy magyar nyelvű áttekintés olvasható Márk Géza István és munkatársai cikkében [208].

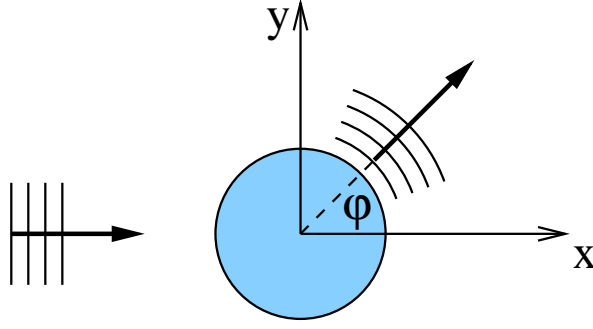
Egy másik ígéretesnek tűnő, negatív törésmutatójú anyag lehet a grafén, melyet először Cheianov és munkatársai javasoltak [183]. Ők az elektron transzmisszióját tanulmányozták egy sík, grafén p - n átmenetnél, és megmutatták, hogy az elektron áramlása a geometriai optika keretében a negatív törésmutatóval értelmezhető. A javaslat jelentőségét erősíti és az alkalmazások lehetőségét bővíti, hogy grafén esetében a kapufeszültség változtatásával könnyedén „hangolhatjuk” a törésmutatót. Elképzelhető, hogy a jövőben előre megtervezett elektronlencsákat készíthetünk ily módon.

A geometriai optikában az egyik érdekes és fontos témakör a *kausztika*. Az optikában a kausztika fénysugarak *burkológörbéje*. A geometria optika szerint ezen a helyen a fény intenzitása végtelen. Így a kausztika környékén az intenzitás csak a hullámelmélet alapján számolható. A kausztikákat nagyon részletesen tárgyalták az irodalomban, itt csak Berry és Upstill kitűnő összefoglaló művére utalunk [209]. A természetben az egyik legismertebb és legszebb kausztika a szivárvány⁶. Ebben a részben elméletileg mutatjuk meg, hogy hasonlóan sík p - n átmenetnél [183] kausztika felléphet kör alakú grafén p - n átmenetnél is, és a kausztikák görbéje a Snellius–Descartes-féle törési törvény alapján számolható, ha a törésmutatót negatívnak vesszük. A negatív törésmutató szoros összefüggésben van a Klein-paradoxonnal, amint ezt a 3.1.3 fejezetben sík p - n átmenet esetében már láttunk. Kör alakú grafén p - n átmenet lényegében egy általánosítása a sík p - n átmenetnek. Az alábbiakban ismertetett számolást tudomásunk szerint először mi végeztük el [A20]. A számítás menete sokban hasonlít a 2.3 fejezetben tárgyalt spinfüggő szóráshoz [A13].

A kausztika kimutatása érdekében vizsgáljuk a ballisztikus elektronok szórását a 3.8 ábrán látható potenciálon! A számolás egyszerűsítése céljából a legegyszerűbb $V(r) = V_0\Theta(R - r)$ kapufeszültséggel számolunk (itt Θ a Heaviside-függvényt jelöli). A potenciál értéke a grafén minden pontjában zérus, kivéve egy R sugarú tartományt, ahol a nagysága egy konstans V_0 érték. Egy ilyen élesen változó potenciálprofil kíséreltetileg akkor valósítható meg, ha $\lambda_F \gg d$, ahol λ_F a Fermi-hullámszám és d a karakterisztikus hossz, melyen a potenciál zérusról V_0 -ra változik. Továbbá, a \mathbf{K} és \mathbf{K}' pontok közti szórási folyamat kizárása érdekében, feltesszük, hogy $d \gg a$, ahol a a grafén rácsállandója.

Amint ezt a 3.1.3 bevezető részben láttuk, negatív törésmutatójú p - n átmenetet úgy hozhatunk létre hogy a bejövő elektron E energiája az n oldalon pozitív (a vezetési sávban van), míg a p oldalon a V_0 potenciálra érvényes $E < V_0$, azaz az elektron a

⁶A szivárványról magyar nyelven részletes összefoglalót írt e dolgozat szerzője [A31], illetve munkatársaival közösen [A35].



3.8. ábra. Grafénben a bejövő elektron-síkhullám egy $V(r)$ forgásszimmetrikus potenciálon szóródik (R sugarú kör alakú, kék tartomány).

vegyértékkötési sávban van. Itt most erre az esetre korlátozodunk ($0 < E < V_0$, lásd a 3.4 b. ábrát), de az általánosítás tetszőleges E -re hasonlóan történik. Megjegyezzük, hogy az elektronok szórási problémáját grafénben már vizsgálták [177, 178, 210]. Mi a kör alakú átmenet belsejében lévő hullámfüggvényre koncentrálnunk. A kausztikák kialakulása a kváziklasszikus határesetben figyelhető meg legjobban, azaz amikor $R \gg \lambda_F$. Azonban a hullámfüggvény egzakt számolásában ilyen feltétellel nem élünk.

A fent leírt rendszer Hamilton-operátora a Dirac-ponthoz közeli E energiára a következő alakú:

$$H = H_0 + V(\mathbf{r}) \mathbf{I} = v \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + V(\mathbf{r}) \mathbf{I}, \quad (3.42)$$

ahol v a Fermi-sebesség (lásd a (3.8b) egyenletet), $\mathbf{p} = -i\hbar \partial/\partial \mathbf{r}$, míg $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ és \mathbf{I} a Pauli-mátrixok és a spinorkomponensekre ható egységmátrix.

Tekintsük a bejövő elektron H Hamilton-operátor által adott rugalmas elektron-szórását! A szórási probléma a jól ismert parciális hullámok módszerének (lásd például [81]) általánosításával tanulmányozható. Egyetlen $E > 0$ energiával bejövő $h_j^{(2)}$ parciális hullámnak (a definíciót lásd lent) a szóródását leíró hullámfüggvény polárkoordinátákban, a szórási tartományon kívül ($r > R$) felírható a H Hamilton-operátor sajátfüggvényeivel:

$$\Psi_j^{(\text{out})} = h_j^{(2)} + S_j h_j^{(1)}, \quad \text{ahol} \quad (3.43a)$$

$$h_j^{(d)}(r, \varphi) = \begin{pmatrix} H_{j-\frac{1}{2}}^{(d)}(k_{\text{out}} r) e^{-i\varphi/2} \\ i H_{j+\frac{1}{2}}^{(d)}(k_{\text{out}} r) e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} e^{ij\varphi}, \quad (3.43b)$$

míg a szórási tartományon belül ($r < R$) a hullámfüggvény:

$$\Psi_j^{(\text{in})} = A_j \chi_j, \quad \text{ahol} \quad (3.44a)$$

$$\chi_j(r, \varphi) = \begin{pmatrix} J_{j-\frac{1}{2}}(k_{\text{in}} r) e^{-i\varphi/2} \\ -i J_{j+\frac{1}{2}}(k_{\text{in}} r) e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} e^{ij\varphi}. \quad (3.44b)$$

Itt a pszeudo-impulzusmomentum $j \in \mathbb{J} \equiv \{\dots, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots\}$, $h_j^{(1)}$ ($h_j^{(2)}$) egy kimenő (bejövő) hengerfüggvény $d = 1$ -nek ($d = 2$ -nek) megfelelően. A hullám-számok $k_{\text{out}} = E/(\hbar v) > 0$ és $k_{\text{in}} = |E - V_0|/(\hbar v) > 0$ (az out/in a szórási tar-

tományon kívül/belül részre utal), míg J_n az elsőfajú Bessel-függvény, $H_n^{(1)}$ és $H_n^{(2)}$ pedig a megfelelő első, illetve másodfajú Hankel-függvények [50]. A forgásszimmetria miatt igaz a $[J_z, H] = 0$ kommutációs reláció, ahol $J_z = -i\hbar\partial_\varphi + \hbar\sigma_z/2$ a pszeudo-impulzusmomentum-operátor z komponense. Így J_z megmarad a szórási folyamatban. Az S_j szórási-mátrixot és az A_j amplitúdót a határfeltételekből határozhatjuk meg, azaz a teljes hullámfüggvény folytonosságából: $\Psi_j^{(\text{out})}(r = R, \varphi) = \Psi_j^{(\text{in})}(r = R, \varphi)$. Ezekből könnyen kapjuk, hogy

$$S_j = \frac{-H_{j-\frac{1}{2}}^{(2)}(X)J_{j+\frac{1}{2}}(X') - H_{j+\frac{1}{2}}^{(2)}(X)J_{j-\frac{1}{2}}(X')}{D_j}, \quad (3.45a)$$

$$A_j = \frac{H_{j-\frac{1}{2}}^{(2)}(X)H_{j+\frac{1}{2}}^{(1)}(X) - H_{j+\frac{1}{2}}^{(2)}(X)H_{j-\frac{1}{2}}^{(1)}(X)}{D_j}, \quad (3.45b)$$

$$D_j = H_{j+\frac{1}{2}}^{(1)}(X)J_{j-\frac{1}{2}}(X') + H_{j-\frac{1}{2}}^{(1)}(X)J_{j+\frac{1}{2}}(X'), \quad (3.45c)$$

ahol $X = k_{\text{out}}R$ és $X' = k_{\text{in}}R$.

Most tekintsük egy balról bejövő síkhullám szórását az $r > R$ részben! Ennek az E energiájú sajátállapota az alábbi alakban írható:

$$\Phi_{\varphi_i}(r, \varphi) = \eta(\varphi_i)e^{ik_{\text{out}}r\cos(\varphi-\varphi_i)}, \quad \text{ahol} \quad (3.46a)$$

$$\eta(\varphi_i) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi_i/2} \\ e^{i\varphi_i/2} \end{pmatrix}, \quad (3.46b)$$

és φ_i a bejövő elektron terjedésének irányát jelöli. Megjegyezzük, hogy a fenti alak lényegében a (3.20) sajátfüggvény polárkoordinátákban kifejezve. Felhasználva a Hankel-függvények tulajdonságait [50] megmutathatjuk, hogy a Φ_{φ_i} függvény parciális hullámokra való felbontása:

$$\Phi_{\varphi_i} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{J}} i^{j-\frac{1}{2}} \left(h_j^{(2)} + h_j^{(1)} \right) e^{-ij\varphi_i}. \quad (3.47)$$

Az általánosság korlátozása nélkül feltehetjük, hogy a terjedés iránya párhuzamos az x tengellyel, azaz $\varphi_i = 0$. Ekkor a hullámfüggvény az $r > R$ tartományban a következő alakban írható:

$$\Psi^{(\text{out})} = \Phi_{\varphi_i=0} + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{J}} i^{j-\frac{1}{2}} (S_j - 1) h_j^{(1)}, \quad (3.48a)$$

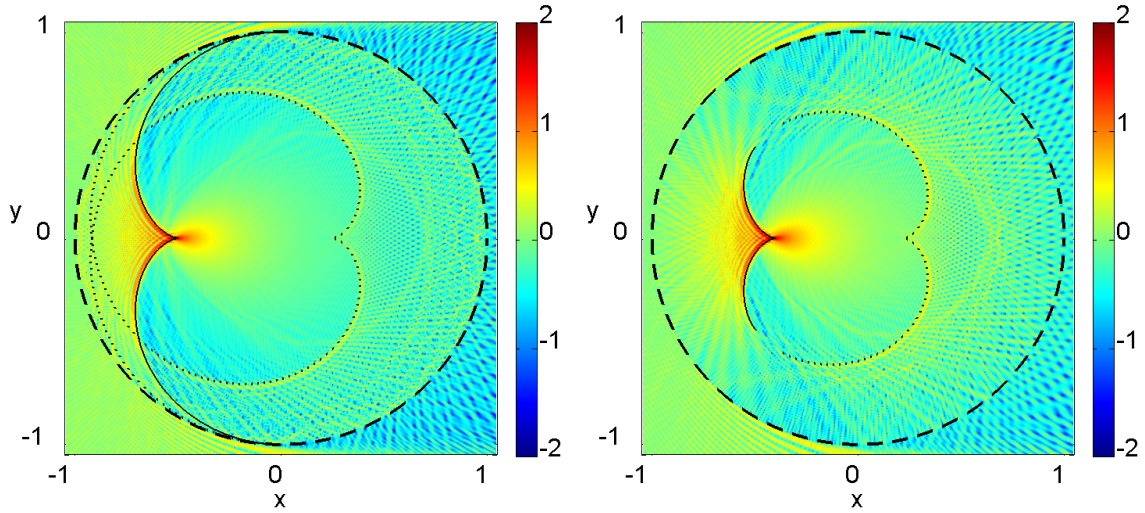
és az $r > R$ tartományban

$$\Psi^{(\text{in})} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{J}} i^{j-\frac{1}{2}} A_j \chi_j. \quad (3.48b)$$

Megjegyezzük, hogy a (3.48a) kifejezésben a második tag a szórt hullámot írja le. A szórási hatáskeresztmetszet a szórt hullám aszimptotikus ($r \gg R$) alakjából kapható.

A (3.45) és (3.48) egyenletekből egzaktul kiszámíthatjuk a hullámfüggvényt mind a szórási tartományon belül és kívül. Vegyük észre, hogy a hullámfüggvény csak a $k_{\text{in}}R$ és $k_{\text{out}}R$ dimenziótlan paraméterektől függ. A 3.9 ábrán látható, hogy hogyan hatol be

a balról ($\varphi_i = 0$ irányból) bejövő síkhullám a p - n átmenet kör alakú tartományába. Az



3.9. ábra. A hullámfüggvényből számolt $|\Psi|^2$ (10-es alapú logaritmus skálán) a szórési tartományon kívül, de közel, illetve bent. A bal oldali ábrán $k_{\text{in}}R = 300$ és $k_{\text{out}}R = 300$, ami $n = -1$ törésmutatónak felel meg (lásd a (3.49) egyenletet), míg a jobb oldali ábrán $k_{\text{in}}R = 300$ és $k_{\text{out}}R = 200$, ami $n = -1.5$ törésmutatót jelent. A szaggatott vonal a p - n átmenet határát jelöli. Az x és y koordináták egysége R . A vastag (pöttyözött) vonal a $p = 1$ ($p = 2$) kausztikának felel meg (lásd a szöveget később).

ábrákon a nagy intenzitású helyek, a kausztikák kialakulása az $r < R$ tartományban jól láthatók a szaggatott, illetve a pöttyözött vonalak mentén. Vodo és munkatársai hasonló hullámfüggvény-mintázatot figyeltek meg kísérletileg, amikor egy sík-konkáv lencsét készítettek negatív törésmutatójú fotonikus kristályból [211].

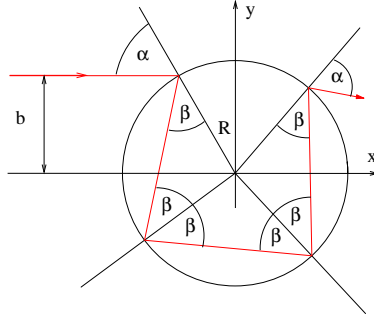
Az élesen változó p - n átmenetű grafénben az elektronok áramlásának optikája kör alakú tartománynál is jól értelmezhető a (3.24) egyenletben megadott negatív törésmutatóval. Esetünkben a Snellius–Descartes-féle törési törvény:

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} := n = -\frac{k_{\text{in}}}{k_{\text{out}}} = -\frac{|E - V_0|}{E}, \quad (3.49)$$

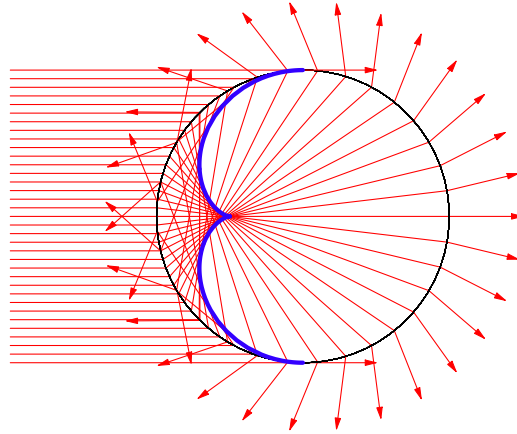
ahol α a beesési szög és β a megtört sugár szöge. Mivel a számolásunkban mind k_{in} és k_{out} pozitívak, a törésmutató negatív lesz, mint a jól tervezett fotonikus kristályokban.

A következőkben megmutatjuk, hogy a hullámfüggvény mintázatában az intenzitás maximumainak helye kiszámítható a Snellius–Descartes-féle törési törvény alapján negatív törésmutatót feltételezve. A 3.10 ábrán látható, hogy hogyan törik meg a bejövő sugár a p - n átmenet határán, és azután hogyan lép ki a kör alakú tartományból. A különböző bejövő sugarakat a $b = R \sin \alpha$ impakt paraméterrel és a körön belüli húrok p számával osztályozhatjuk, ami $p - 1$ számú belső reflexiónak felel meg. A különböző impakt paraméterrel ($-R \leq b \leq R$) bejövő sugarak burkolója a körön belül a kausztika, ahogy ez a 3.11 ábrán látható $p = 1$ esetben. Mindegyik húrnak saját kausztikája van.

A differenciálgeometria elemeit felhasználva kiszámíthatjuk a kausztika görbét, és a 3.10 ábrán látható derékszögű koordinátákban a p -dik kausztika görbájének α



3.10. ábra. Egyelen, balról bejövő elektronsugár pályája a kör alakú p - n átmenetben. A b impakt paraméterrel és α szöggel bejövő sugár β szögben törik meg az átmenet határán, és aztán $p - 1$ belső reflexió után kilép a kör alakú p - n átmenetből. Itt $p = 3$, $n = -1.3$ és $\alpha = 60^\circ$.



3.11. ábra. A p - n átmenet belsejében a megtört sugarak burkolójaként kialakuló kausztika. A kék, vastag vonal a (3.50) egyenletből számolt kausztika görbéje. Itt $p = 1$ és $n = -1$.

paraméterrel adott paraméteres egyenlete:

$$\frac{\mathbf{r}_c(p, \alpha)}{R} = (-1)^{p-1} \left[\begin{pmatrix} -\cos \Theta \\ \sin \Theta \end{pmatrix} + \cos \beta \frac{1 + 2(p-1)\beta'}{1 + (2p-1)\beta'} \begin{pmatrix} \cos(\Theta + \beta) \\ -\sin(\Theta + \beta) \end{pmatrix} \right], \quad (3.50a)$$

$$\text{ahol } \Theta(p, \alpha) = \alpha + 2(p-1)\beta, \quad \sin \beta = \frac{\sin \alpha}{|n|} \quad \text{és} \quad \beta' = \frac{\cos \alpha}{\sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}}. \quad (3.50b)$$

Itt $-\pi/2 < \alpha < \pi/2$ között változik, és a vessző az α szerinti deriváltat jelöli. A 3.9 ábrán az egzakt hullámfüggvény interferencia-mintázatból kialakuló kausztika helye látszik összehasonlítva a (3.50) egyenletből kapott eredménnyel. Jól látszik a kitűnő egyezés. A $p > 2$ -höz tartozó kausztikák kevésbé látszanak, mivel minden egyes belső reflexiónál a sugár intenzitása fokozatosan csökken.

Világos, hogy $p > 2$ -hez tartozó kausztikákat az n törésmutató teljesen meghatározza. A katasztrófa elmélet szerint [209] a kausztikák kör alakú p - n átmenetnél a csúcsos típusú (angolul cusp) kausztikákhoz tartoznak. A rendszer x tengelyre való tükrösszimmetriája miatt a kausztika is mutatja ezt a szimmetriát, és a kausztika

csúcsa mindig az x tengelyen van. A (3.50) egyenletből $\alpha = 0$ -ra könnyen kapjuk a p -dik kausztika csúcsának helyét (az $(x, y) = (x_{\text{cusp}}, 0)$ koordinátájú pontok):

$$x_{\text{cusp}}(p) = \frac{(-1)^p}{|n| - 1 + 2p} R. \quad (3.51)$$

A csúcsok helye felváltva helyezkedik el, azaz $x_{\text{cusp}}(p)$ pozitív vagy negatív attól függően, hogy p páros vagy páratlan.

Amint a 3.11 ábrán látható, paraxiális közelítésben ($\alpha \ll 1$) a bejövő sugarak a fókuszpontba fókuszálódnak. Az f fókusz távolság az $(r, \varphi) = (R, \pi)$ ponttól mérve: $f = R - |r_{\text{cusp}}| = R|n|/(|n| + 1)$. Ugyanezt kapjuk, ha a törésmutatót kicseréljük annak negatív értékével a hagyományos optikában ismert fókusz távolság képletében [212]. Fotonikus kristályban a negatív törésmutató kimutatása éppen a fókusz távolság mérése alapján történt [211].

Grafénben a kausztikák és a fókuszáló effektus kísérleti vizsgálatához kollimált elektronnyalábra van szükség. Ez elérhető egy *sima és sík* p - n átmenettel, hiszen a (3.31) egyenlet kapcsán láttuk, hogy a transzmittált elektron szelektív módon csak a merőlegesen beeső elektronokra jelentős [184]. Ezért egy lehetséges elrendezés egy pontszerű elektronforrásból, egy szelektíven transzmittáló sík p - n átmenetből, egy kör alakú szórási tartományból és egy elnyelő elektródából áll. Az egyes tartományokban a töltéssűrűség helyfüggése esetleg pásztázó elektronmikroszkóppal mérhető.

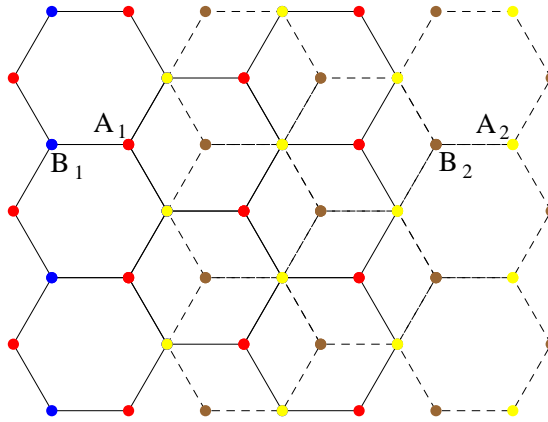
A kör alakú p - n átmenet a sík átmenettel együtt az elektron-optika építőköve lehet grafénben. Azonban a törésmutató változik az energiával, és így a kísérleteket alacsony hőmérsékleten kell végezni az éles mintázat kialakulásához. Amint azt korábban említettük a kísérletekben a \mathbf{K} és \mathbf{K}' pontok közti szórási folyamat kizárása miatt a $a \ll d \ll \lambda_F \equiv 2\pi/k_{\text{out}}$ feltétel is fontos. Egy másik feltétel a kausztikák körüli éles interferencia-mintázat vizsgálatához a kváziklasszikus $k_{\text{in}} R \gg 1$ határeset teljesülése. A fenti feltételek például $E = 40$ meV energiájú elektronnal $V_0 = 80$ meV kapufeszültséggel megvalósíthatók, hiszen a legutóbbi kísérletek szerint $d \sim 10$ nm [213], és $n = -1$ törésmutatóval $k_{\text{in}} R = 50$ és $\lambda_F = 10d$.

Összefoglalva, kiszámoltuk egzaktul kör alakú grafén p - n átmenetnél a bejövő síkhullámok szórását egy körszimmetrikus lépcső-szerű potenciál esetén. Megmutattuk, hogy a hullámfüggvény interferencia-mintázatában a maximális intenzitású helyek a kausztikák körül találhatók, amelyek a Snellius–Descartes-féle törési törvény alapján negatív törésmutatót feltételezve számolhatók. Így a kausztikák léte bizonyíték a negatív törésmutató létezésére grafénben.

3.3. Minimális vezetőképesség egy- és kétrétegű grafénben Kubo-formulával

A fejezet további részében a [A19, A21] cikkeinkben közölt eredményeinket foglaljuk össze.

A grafén pikkelyek izolálása közben gyakran lehet találni kétrétegű grafén darabkákat is. Kétrétegű grafénben a kvantum Hall-effektust kísérletileg először Novoselov és munkatársai [214] tanulmányozták, míg a megfigyelt Hall ellenállás platóinak szekvenciáját elméletileg McCann és Fal'ko [215] értelmezték. Kétrétegű grafénben a szénatomok az ún. *Bernal-rétegződésben* helyezkednek el, ahogy ez a 3.12 ábrán látható.



3.12. ábra. Kétrétegű grafén szénatomjainak elhelyezkedése. Az egyik grafén réteg fölött Bernal-rétegződésben helyezkedik el a másik réteg. Az A_1 (piros) és B_1 (kék) atomokból álló grafén réteg (fekete vonal) fölött úgy helyezkedik el az A_2 (sárga) és B_2 (barna) atomokból álló második réteg (szaggatott vonal), hogy a B_1 szénatom fölött az A_2 atom van. A két grafén réteg közti távolság $c \approx 3,4 \text{ \AA}$. Az elemi cellában négy bázisatom van.

A grafénhez hasonlóan a kétrétegű grafén szerkezetet is intenzíven vizsgálták. Az egy- és kétrétegű grafén elektromos tulajdonságairól kitűnő áttekintés olvasható a [164], illetve a [217] művekben. Az elektromos sávszerekezetben fellépő gap asszimmetriáját McCann tanulmányozta elméletileg [216]. Ha a két rétegre ellentétes kapufeszültséget kapcsolunk, akkor a gap hangolható a feszültséggel [218] és kísérletileg kontrollálható [219]. A kétrétegű grafén optikai és magneto-optikai tulajdonságait a távoli infravörös tartományban Abergel és munkatársai vizsgálták [220]. A szennyezők szerepét Nilsson és Neto [221] tanulmányozták. Pereira és munkatársai elméletileg mutatták meg, hogy kétrétegű grafénből kvantum pötty alakítható ki [222]. Ludwig a normál-szupravezető szerkezet vezetőképességét számolta ki [223]. Nemrég, Koshino és Ando a kétrétegű grafén transzport-tulajdonságait vizsgálta Born-közelítésben [224], és azt találták, hogy erősen szennyezett mintában a fajlagos vezetőképesség $\sigma_{xx}^{min} = (8/\pi) e^2/h$, míg gyengén szennyezett mintában $\sigma_{xx}^{min} = (24/\pi) e^2/h$, azaz hatszor nagyobb, mint egyrétegű grafénben (lásd a (3.41) egyenletet). Hasonlóan, Katsnelson a Landauer-formula segítségével számolta ki a minimális fajlagos vezetőképességet és $\sigma_{xx}^{min} = 2 e^2/h$ értéket kapott. E dolgozat szerzője a Kubo-formulából kiindulva

$\sigma_{xx}^{min} = (8/\pi) e^2/h$ értéket kapott [A19], melyet röviddel később Snyman és Beenakker a Landauer-formulát használva megerősített [227].

Azonban, sokkal kevesebb tanulmány foglalkozott a *trigonális torzulás* (trigonal warping) szerepével kétrétegű grafénben. Ennek lényegét az alábbiakban ismertetjük. A trigonális torzulás hatását a gyenge lokalizációra Kechedzhi és munkatársai [228], míg a minimális fajlagos vezetőképességre Koshino és Ando vizsgálták egy effektív 2 x 2-es Hamilton-operátort véve [224].

Ebben a részben a Kubo-formulát alkalmazva, és McCann és Fal'ko [215] által javasolt Hamilton-operátorból kiindulva kiszámítjuk a kétrétegű grafén-mintának a minimális fajlagos vezetőképességét a trigonális torzulás erősségének függvényében. Meglepő módon azt kapjuk, hogy a vezetőképesség *független* a trigonális torzulás erősségétől, és *hatszor* nagyobb, mint az egyrétegű grafénben.

Kétrétegű grafénben a legerősebb csatolás a rétegen belül van: az A_1 és B_1 , illetve A_2 és B_2 szénatomok között a csatolás γ_0 . A két réteg közti legerősebb csatolás az egymás fölött elhelyezkedő A_2 és B_1 atomok között van, melyet γ_1 -gyel jelölünk. Az A_1 és B_2 atomok közti csatolást a $\gamma_3 \ll \gamma_1$ csatolási állandóval vesszük figyelembe. Ez a csatolás felelős a trigonális torzulásért. A fenti csatolási állandókat különböző munkákban becsülték meg, és a következő értékeket kapták: $\gamma_0 = 3,16$ eV [179], $\gamma_1 = 0,39$ eV [229], és $\gamma_3 = 0,315$ eV [230].

Számolásunkban figyelembe vesszük a trigonális torzulást, ezért ugyanazt a Hamilton-operátort használjuk, mint amit a [215, 225] cikkekben. A Hamilton-operátor a \mathbf{K} pont körül az A_1, B_1, A_2, B_2 bázisban, illetve a \mathbf{K}' pont körül a B_1, A_1, B_2, A_2 bázisban a következő alakú:

$$H_{b1} = \xi \begin{pmatrix} 0 & vp_- & 0 & v_3p_+ \\ vp_+ & 0 & \xi\gamma_1 & 0 \\ 0 & \xi\gamma_1 & 0 & vp_- \\ v_3p_- & 0 & vp_+ & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.52)$$

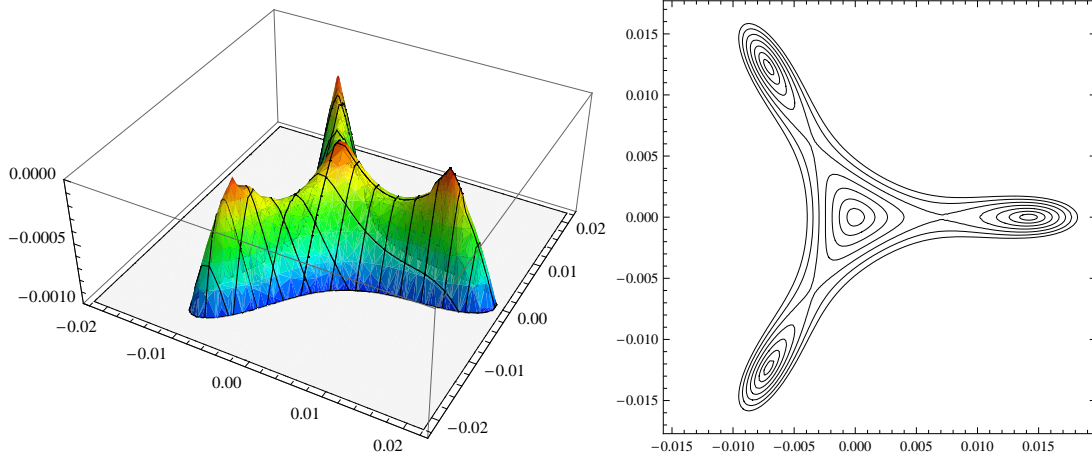
ahol $p_{\pm} = p_x \pm ip_y$, $v = \sqrt{3}a\gamma_0/(2\hbar)$ és $v_3 = \sqrt{3}a\gamma_3/(2\hbar)$, míg $\xi = +1$ a \mathbf{K} pontra és $\xi = -1$ a \mathbf{K}' pontra (itt $a = 0,246$ nm a rácsállandó). A trigonális torzulás erősségét a $\beta = v_3/v = \gamma_3/\gamma_0$ dimenzióatlan paraméterrel vehetjük számításba. Korábbi munkák alapján [179, 215, 230] ez a paraméter $\beta \approx 0,1$.

A fenti (3.52) Hamilton-operátor négy sajátértéke a $\mathbf{k} = k(\cos \varphi, \sin \varphi)$ hullámszámvektor függvényében könnyen kiszámolható:

$$E_n(k, \varphi) = \pm \gamma_1 \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \tilde{k}^2 (\beta^2 + 2) + (-1)^n \Gamma \right]}, \quad \text{ahol} \quad (3.53a)$$

$$\Gamma = \sqrt{1 - 2\tilde{k}^2 (\beta^2 - 2) + \tilde{k}^4 \beta^2 (\beta^2 + 4) + 8\tilde{k}^3 \beta \cos 3\varphi}, \quad (3.53b)$$

és $n = 1, 2$, míg az átskálázott hullámszám $\tilde{k} = k\hbar v/\gamma_1$. Véges β -ra a $\cos 3\varphi$ tag a kristályszerkezet háromfogsú szimmetriájának a következménye. A \mathbf{K} pontban ($\tilde{k} = 0$), illetve a három úgynevezett „zseb” közepén (ezek polárkoordinátái: $\tilde{k} = \beta$ és $\varphi = 0, 2\pi/3, 4\pi/3$) az E_1 energia zérus (lásd a 3.13 ábra bal felét). Az utóbbi három pont körül az állandó energiavonalak eltorzulnak, ahogy ez a 3.13 ábra jobb oldali felén látható. Ezt nevezik trigonális torzulásnak. A pozitív és a negatív E_1 diszperziós



3.13. ábra. A bal oldali ábrán a negatív E_1 diszperziós reláció látható (γ_1 egységekben) a $(\tilde{k}_x, \tilde{k}_y)$ síkban a Brillouin-zóna \mathbf{K} pontja körül (ez az origó az ábrán). A (3.53) képletben a négyzetgyök előtt szereplő plusz/minusz előjelek miatt a pozitív E_1 diszperziós reláció a negatívnak a tükrözöttje a $(\tilde{k}_x, \tilde{k}_y)$ síkra. A jobb oldali ábra a pozitív E_1 diszperziós reláció konstans energiavonalait mutatja. Az állandó energiavonalak egyenlő nagysággal következnek úgy, hogy a legkülső energia $2E_L$ (lásd a szöveget). A számolásnál $\beta = 0,1$ értéket vettünk.

reláció érdekes tulajdonságot mutat. Pozitív E_1 esetben egy bizonyos energia alatt az állandó energiavonal négy darab „zsebre” hasad fel, amelyek közül a középső (a \mathbf{K} pont körül) körszimmetrikus, míg a három másik ellipszis alakú. A felhasadás jelenségét az irodalomban Lifshitz-átmenetnek nevezik [231]. Ennek az energiának, másnéven a Lifshitz-energiának az értéke $E_L = \gamma_1 \beta^2 / (4 + \beta^2) \approx 1$ meV. Ha $v_3 \ll v$, azaz $\beta \ll 1$ esetben a kétdimenziós Fermi-felület szeparációja nagyon kis töltéssűrűség mellett lép fel, $n < n_L \sim 1 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ (itt n_L a Lifshitz-sűrűséget jelöli). Ha $n < n_L$, akkor a középső kör alakú zseb területe közelítőleg $\mathcal{A}_c \approx \pi E^2 / (\hbar v_3)^2$, míg a három ellipszis alakú zseb területe $\mathcal{A}_\ell \approx \frac{1}{3} \mathcal{A}_c$. Ha $E \ll E_L$, akkor a diszperziós reláció lineáris k -ban. Az állandó energiavonalak hasonlóak a \mathbf{K}' pont körül. Ugyanakkor $\beta = 0$ esetben nincs trigonális torzulás, azaz a sajátértékek forgásszimmetrikusak, és csak a \mathbf{K} és \mathbf{K}' pontokban van Dirac-kúp.

Nemrégén Koshino és Ando [224] tanulmányozták a minimális fajlagos vezetőképességet kétrétegű grafénre egy olyan 2×2 -es Hamilton-operátort használva, ami jól közelíti a trigonális torzulást. Az alakja a következő:

$$H_{b2} = g_2 \begin{pmatrix} 0 & \tilde{p}_-^2 - \tilde{p}_+^2 \\ \tilde{p}_+^2 - \tilde{p}_-^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.54)$$

ahol az effektív csatolási állandó $g_2 = \gamma_1 \gamma_3^2 / \gamma_0^2$, az átskálázott impulzus $\tilde{p}_\pm = (p_x \pm i p_y) / p_0$ és $p_0 = 2\hbar \gamma_1 \gamma_3 / (\sqrt{3} a \gamma_0^2)$.

A legegyszerűbb 2×2 -es Hamilton-operátor, amit McCann és Fal'ko [215] használtak a kétrétegű grafén Hall-ellnállásának értelmezésére a következő alakú:

$$H_{b3} = -g_3 \begin{pmatrix} 0 & p_+^2 \\ p_-^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.55)$$

ahol $g_3 = v^2/\gamma_1$ ismét egy effektív csatolási állandó. Ebben az esetben nincs trigonális torzulás. A továbbiakban az egyrétegű grafénre, illetve a fenti három H_{b1}, H_{b2} és H_{b3} Hamilton-operátorra kiszámoljuk a minimális fajlagos vezetőképességet a Kubo-formula segítségével.

A számítások érdekében a Kubo-formulának Ryu és munkatársai által használt alakjából indulunk ki [199], ami zérus frekvencián és zérus hőmérsékleten érvényes:

$$\sigma_{\mu\nu}^{\min} = n_s n_v \lim_{\eta \rightarrow 0} \sigma_{\mu\nu}(\eta), \text{ ahol} \quad (3.56a)$$

$$\sigma_{\mu\nu}(\eta) = -\delta_{\mu\nu} \frac{\hbar}{4\pi} \int \frac{d^2 \mathbf{r}}{S} \int d^2 \mathbf{r}' \Sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E=0, \eta), \quad (3.56b)$$

$$\Sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E, \eta) = \text{Tr} [G^{\text{A-R}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E, \eta) j_\mu G^{\text{A-R}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E, \eta) j_\nu]. \quad (3.56c)$$

Itt $(\mu, \nu) = x, y$, míg a spin degeneráció $n_s = 2$. A \mathbf{K} és \mathbf{K}' pontok szerinti degeneráció $n_v = 2$, a minta területe S . A (3.56c) egyenletben a spúrt a spinor indexekre kell venni. A $G^{\text{A-R}}$ Green-függvény a retardált és az avanszált Green-függvények különbsége:

$$G^{\text{A-R}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E, \eta) = G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E, \eta) - G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E, \eta), \quad (3.56d)$$

ahol a G^\pm függvények eltolásinvariáns rendszerre az egyrészeszke Green-függvényből kaphatók:

$$G^\pm(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; E, \eta) = \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)} G^\pm(\mathbf{k}; E, \eta), \quad (3.56e)$$

$$G^\pm(\mathbf{k}; E, \eta) = [E \pm i\eta - H(\mathbf{k})]^{-1}, \quad (3.56f)$$

$$H(\mathbf{k}) = H(\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}), \quad (3.56g)$$

és végül az áram-operátor

$$j_\mu = i \frac{e}{\hbar} [H, r_\mu] = \frac{e}{\hbar} \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_\mu}. \quad (3.56h)$$

A fenti (3.56b) kifejezés a

$$(-z - H)^{-1} - (z - H)^{-1} = -2z(z^2 - H^2)^{-1}$$

operátor-azonosság segítségével tovább egyszerűsíthető (itt z egy skálár). Legyen $z = i\eta$ és használjuk ki, hogy a rendszer eltolásinvariáns, akkor $\sigma_{\mu\nu}(\eta)$ a (3.56b) egyenletben a következő alakú lesz

$$\sigma_{\mu\nu}(\eta) = \delta_{\mu\nu} \frac{2e^2}{\hbar} \eta^2 I(\eta), \text{ ahol} \quad (3.57a)$$

$$I(\eta) = \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \text{Tr} \left[[\eta^2 + H^2(\mathbf{k})]^{-1} \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_\mu} [\eta^2 + H^2(\mathbf{k})]^{-1} \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_\nu} \right]. \quad (3.57b)$$

Ez, az általam először levezetett képlet a Kubo-formula módosított változata, mely a Dirac-pontban a minimális fajlagos vezetőképesség kiszámítására hatékonyan alkalmazható.

Mielőtt részletesen vizsgálánánk a kétrétegű grafén esetét, érdemes és tanulságos megnézni, hogyan alkalmazható a (3.57b) egyenlet egyrétegű grafénre. Ebben az esetben a Hamilton-operátor a 3.1.2. bevezető fejezetben levezetett (3.17) egyenletben definiált H_+ operátor. Megmutatható, hogy a H_- operátor esetén ugyanaz az eredmény adódik a minimális fajlagos vezetőképességre, így egy 2-es faktorról vehető figyelembe. A (3.57b) egyenletben fellépő integrál könnyen kiszámolható, ha a $\mathbf{k} = k(\cos \varphi, \sin \varphi)$ polárkoordinátákat használjuk:

$$I(\eta) \equiv I_s(\eta) = \int_0^\infty \frac{2\hbar^2 v^2 k}{(\hbar^2 v^2 k^2 + \eta^2)^2} \frac{dk}{2\pi} = \frac{1}{2\pi\eta^2}, \quad (3.58)$$

Itt s az egyrétegű (single) grafénre utal. Látható, hogy az eredmény független a v sebességtől. Megjegyezzük, hogy a legjelentősebb járulék az integrálhoz a $k = 0$ környékéből származik, ezért a k szerinti integrál kiterjeszthető a végtelenbe [197]. Végül felhasználva a (3.57a) és (3.56a) egyenleteket a minimális fajlagos vezetőképességre a jól ismert univerzális értéket $\sigma_{xx}^{min} = (4/\pi)(e^2/h)$ kapjuk [193, 195–199, A19]. Megjegyezzük, hogy a 3.1.5 fejezetben a Landauer formulával ugyanezt az eredményt kaptuk (lásd a (3.41) egyenletet).

A továbbiakban rátérünk a kétrétegű grafén esetére figyelembe véve a trigonális torzulást is. A j_x áram-operátor a (3.52) Hamilton-operátor esetén:

$$j_x = i \frac{e}{\hbar} [H, r_x] = \frac{e}{\hbar} \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_x} = \xi \frac{ev}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \beta \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ \beta & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.59)$$

Ez a derivált szerepel a (3.57b) egyenletben. Hasonlón számolható a j_y áram-operátor is. A (3.57b)-ben szereplő $I(\eta) \equiv I_{b1}(\beta, \eta)$ integrál függ a trigonális torzulás erősségére jellemző β paramétertől. Könnyen belátható, hogy $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$ és $\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0$, ezért célszerű a $(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$ mennyiséget számolni. Ismét polárkoordinátákban számolva, és bevezetve a $k \rightarrow k\hbar v/\gamma_1$ és az $\eta \rightarrow \eta/\gamma_1$ új változókat viszonylag egyszerű algebrai számolással a következőt kapjuk $\xi = +1$ -re (\mathbf{K} pont körül):

$$I_{b1}(\beta, \eta) = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} k \frac{A + B \cos 3\varphi}{(C + D \cos 3\varphi)^2} \frac{d\varphi}{2\pi} \frac{dk}{2\pi}, \quad \text{ahol} \quad (3.60a)$$

$$A = k^4 (2 + 5\beta^2) + (1 + \eta^2) [4k^2 (1 + \beta^2) + 2\eta^2 + \beta^2 (1 + \eta^2)], \quad (3.60b)$$

$$B = 4k^3 \beta, \quad (3.60c)$$

$$C = k^4 + \eta^4 + \eta^2 + k^2 [2\eta^2 + \beta^2 (1 + \eta^2)], \quad (3.60d)$$

$$D = -2k^3 \beta. \quad (3.60e)$$

Itt a $b1$ index a (3.52)-ban definiált Hamilton-operátorra utal. Az integrál háromtengelyű forgásszimmetriát mutat a kétrétegű grafén kristályszimmetriájának megfelelően. Belátható, hogy $\xi = -1$ -re (\mathbf{K}' pont körül) ugyanezt az eredményt kapjuk, és így ezt a tényt a vezetőképességben ismét egy 2-es faktorról vehetjük figyelembe, azaz $n_v = 2$.

A φ szerinti integrál analitikusan kiszámolható és $I_{b1}(\beta, \eta)$ -re következőt kapjuk:

$$I_{b1}(\beta, \eta) = 2 \int_0^\infty k \frac{AC - BD}{(C^2 - D^2)^{3/2}} \frac{dk}{2\pi}. \quad (3.61)$$

Egyszerűen számíthatjuk ki a k szerinti integrált is, ha nincs trigonális torzulás, azaz a $\beta = 0$ esetben:

$$I_{b1}(\beta = 0, \eta) = \int_0^\infty \frac{dk}{2\pi} \frac{4k(k^4 + \eta^4 + \eta^2 + 2k^2 + 2k^2\eta^2)}{(k^4 + \eta^4 + \eta^2 + 2k^2\eta^2)^2} = \frac{1}{\pi\eta^2}. \quad (3.62)$$

Így a (3.57a) és (3.56a) egyenletek alapján a minimális fajlagos vezetőképességre a

$$\sigma_{xx}^{min}(\beta = 0) = (8/\pi)(e^2/h) \quad (3.63)$$

univerzális értéket kapjuk.

Jóval nehezebb a számolás véges β -ra. A (3.61)-ben szereplő integrál a következő eredményre vezet:

$$I_{b1}(\beta, \eta) = \frac{1}{4\pi\eta^2} \left(12 - \frac{127 + 145\beta^2 + 38\beta^4}{\beta^6 + \beta^4} \eta^2 \right), \quad (3.64)$$

plusz $O(\ln \eta)$ és $O(\eta^2)$ nagyságrendű tagok. Ismét a (3.57a) és (3.56a) egyenletek alapján a minimális fajlagos vezetőképességre az alábbi figyelemre méltó eredményt kapjuk:

$$\sigma_{xx}^{min}(\beta) = (24/\pi)(e^2/h). \quad (3.65)$$

A végeredmény független a trigonális torzulás erősségétől, azaz a β paramétertől. Ennek a fejezetnek ez a fő eredménye. Ez az univerzális érték hatszor nagyobb, mint egyrétegű grafénre. Meglepő módon $\sigma_{xx}^{min}(\beta)$ *nem folytonos* függvény $\beta = 0$ körül, hiszen $\beta = 0$ -ra a (3.63) egyenlet szerint $\sigma_{xx}^{min}(\beta = 0) = (8/\pi)(e^2/h)$, míg *bármilyen véges* β -ra a vezetőképesség háromszor nagyobb. Ez a nem-analitikus viselkedés abból származik, hogy tetszőleges véges β -ra az n töltéssűrűség mindig kisebb az n_L Lifshitz-sűrűségnél, ahol a kétdimeziós Fermi-felület négy külön álló zsebre hasad fel, míg $\beta = 0$ -ra nincs Lifshitz-átmenet, mindig csak egy Fermi-vonal létezik a **K** és **K'** pontok körül. A Lifshitz-átmenet ugrásszerűen változik $\beta = 0$ körül.

Tekintsük most a (3.54) egyenletben adott H_{b2} Hamilton-operátort, melyet Koshino and Ando használt a fajlagos vezetőképesség számolására önkonzisztens Born-közelítésben [224]. Megjegyezzük, hogy ebben az esetben nincs semmilyen olyan paraméter, amellyel a trigonális torzulás erőssége változtatható lenne. A g_2 csatolási állandó kiesik a számolás végén, így ebben az esetben a trigonális torzulás fixen be van építve a modellbe. Felhasználva a (3.57b) egyenletet megismételhetjük a számolást a (3.54)-beli H_{b2} Hamilton-operátorral, és kissé hosszadalmas számolás után a következőt kapjuk:

$$I(\eta) \equiv I_{b2}(\eta) = \frac{1}{4\pi\eta^2} (12 - 127\eta^2), \quad (3.66)$$

plusz $O(\ln \eta)$ és $O(\eta^2)$ nagyságrendű tagok. Itt a $b2$ index a H_{b2} Hamilton-operátorra utal. Így a minimális fajlagos vezetőképességre ugyanaz a $\sigma_{xx}^{min}(\beta) = (24/\pi)(e^2/h)$

univerzális érték adódik, mint a (3.52)-beli H_{b1} Hamilton-operátor esetén.

Végül a teljesség kedvéért számoljuk ki a minimális fajlagos vezetőképességet a legegyszerűbb H_{b3} Hamilton-operátorra, melyet a (3.55) egyenlet definiál! Ekkor az integrál egzaktul elvégezhető:

$$I(\eta) \equiv I_{b3}(\eta) = \int_0^\infty \frac{dk}{2\pi} \frac{8g_3^2 k^3}{\eta^2 + g_3^2 k^4} = \frac{1}{\pi\eta^2}. \quad (3.67)$$

Így a minimális fajlagos vezetőképességre ismét ugyanazt a $\sigma_{xx}^{min} = (8/\pi)(e^2/h)$ univerzális értéket kapjuk, mint amit a (3.52) egyenletben adott H_{b1} Hamilton-operátorral $\beta = 0$ esetben. Ezt az eredményt először [A19] cikkben vezettem le, majd nem sokkal később Snyman és Beenakker [227] a Landauer-formulát használva.

Összefoglalva, kiszámoltuk a minimális fajlagos vezetőképességet kétrétegű grafénre három különböző, az irodalomban használt Hamilton-operátor esetén. Azt találtuk, hogy ha nincs trigonális torzulás, akkor a vezetőképesség *mindig* kétszer akkora, míg a trigonális torzulást figyelembe véve *hatszor* akkora, mint egyrétegű grafénben. A minimális fajlagos vezetőképesség a trigonális torzulás erősségének nem folytonos függvénye. Ugyanakkor, minden esetben univerzális értéket kaptunk a vezetőképességre, ami azt sugallja, hogy a vezetőképesség kétrétegű grafénben topológia eredetű. Azonban ennek kimutatása további kutatást igényel. Pár hónappal ezelőtt Moghaddam és Zareyan kiszámolták a minimális fajlagos vezetőképességet a Dirac-pontban a 3.1.5 fejezetben vázolt eljáráshoz hasonlóan, a Landauer formulát használva [232]. Számolásaikban figyelembe vették az elektródák orientációja és a kétrétegű grafén szimmetria tengelye közti θ szöget is, és anizotróp viselkedést kaptak θ függvényében. Azonban $\theta = 0$ szögre ugyanazt a $\sigma_{xx}^{min} = (24/\pi)(e^2/h)$ univerzális értéket kapták, mint mi. Későbbi célunk, hogy tanulmányozzuk a vezetőképességet a kapufeszültség függvényében is, azaz a Dirac-ponttól eltávolodva.

3.4. Kígyóállapotok grafénben

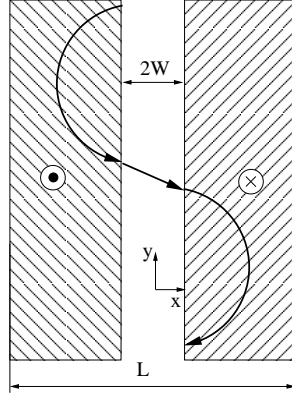
A fejezet további részében a [A22] cikkben közölt eredményeinket foglaljuk össze.

Számos kísérleti és elméleti munkában tanulmányozták az elektronok gerjesztési spektrumát és transzport-tulajdonságait kétdimenziós elektrongázban, merőlegesen inhomogén mágneses térben. Például ismert, hogy inhomogén mágneses térben egy speciális állapot létezik, melyet *kígyóállapotnak* neveznek (angolul *snake state*), és azon a határon alakul ki, ahol a mágneses tér irányt vált. A kígyóállapotot először Müller tanulmányozta elméletileg [233], és munkája később nagy érdeklődést váltott ki (lásd pl. [234] cikket és a benne lévő hivatkozásokat).

Az inhomogén mágneses térnek elektronokra való hatását grafénben sokkal kevesebben vizsgálták. Mint korábban a 3.1.3 fejezetben láttuk a Klein-paradoxon miatt az elektronok nem zárhatók be elektromos potenciállal. Azonban inhomogén mágneses térben elvben már bezárhatók, ahogy ezt először Martino és munkatársai mutattak ki [235]. Tahir és Sabeeh a grafén mágneses vezetőképességet vizsgálták térben modulált mágneses térben, és megmutatták, hogy az ún. Weiss-oszcilláció amplitúdója (a vezetőképesség oszcillációja a mágneses tér függvényében) nagyobb, mint kétdimenziós elektrongázban [236]. A grafén nem tökéletesen sík, a grafén mintának egy enyhe hullámszáma lehetséges a síkra merőleges irányban. Ennek a hullámszámnak a szerepét az alacsony energiás elektronsávokra Guinea és munkatársai vizsgálták úgy, hogy a hullámszámot egy inhomogén effektív mágneses térrel modellezték [237]. Azonban a kígyóállapotokat csak szén nanocsövekben tanulmányozták, Nemec és Cuniberti [238], illetve Lee és Novikov [239].

Ebben a fejezetben a kígyóállapotokat tanulmányozzuk egyrétegű grafénben. Ezt a számolást először mi végeztük el [A22], majd egy héttel később Ghosh és munkatársai hasonló eredményekre jutottak [240]. Az elrendezést a 3.14 ábra mutatja. A mágneses tér merőleges a grafén síkjára, és lépcsőszerűen változik az ábrának megfelelően, azaz zérus a $2W$ szélességű tartományban, ezen kívül balra és jobbra pedig azonos B nagyságúak, de ellentétes irányúak. Feltesszük, hogy a minta teljes szélessége $L \gg W$. Megmutatjuk, hogy ebben a rendszerben a kígyóállapotok a középső, zérus mágneses tér tartományában lokalizálódnak, és az általuk vitt áram kompenzálódik a minta szélén haladó áramokkal.

A 3.1.4 fejezetben ismertettük az elektron dinamikáját homogén mágneses térben. A Dirac-Hamilton-operátor alacsony energiás közelítésben a (3.32) egyenlettel adott. Mint láttuk inhomogén térben is igaz, hogy a Hamilton-operátor a \mathbf{K} és \mathbf{K}' pontok szerint degenerált, így elegendő például a \mathbf{K} pont körüli H_+ Hamilton-operátorral számolni. Az energiaspektrum meghatározása érdekében ismét a $H_+\Psi(x, y) = E\Psi(x, y)$ Schrödinger-egyenletet kell megoldani. A rendszer y irányban eltolásinvariáns, és ha a vektorpotenciált Landau-mértékben a $\mathbf{A} = (0, A_y(x), 0)^T$ alakban vesszük fel, akkor $[H_+, p_y] = 0$, azaz H_+ -nak és p_y -nak közös a sajátfüggvénye. Így a hullámfüggvény szeparálható: $\Psi(x, y) = \Phi(x)e^{iky}$, ahol k a hullámszám az y irányban. A számítások érdekében feltesszük, hogy $L \gg l$, ahol $l = \sqrt{\hbar/|eB|}$ a mágneses hossz. A minta három tartományában a hullámfüggvény alakját szimmetria-megfontolásokból kaphatjuk. Könnyű látni, hogy $[H, \sigma_y T_x] = 0$, ahol T_x a tükrözés-operátor, azaz tetszőleges $f(x)$ függvényre $T_x f(x) = f(-x)$. Ez azt jelenti, hogy a $\Phi(x)$ függvény páros vagy páratlan függvények szerint osztályozható, azaz páros függvényre



3.14. ábra. A mágneses tér merőleges a grafén síkjára, és zérus a középső $2W$ szélességű tartományban, míg a csík két oldalán ellentétes irányú, de azonos B nagyságú. A minta teljes szélessége L . A minta három tartományra bontható: a bal oldali részre $x \leq -W$, a középső részre $|x| \leq W$, míg a jobb oldali részre $x \geq W$. Egy tipikus kígyóállapot klasszikus trajektóriája látható az ábrán.

$\sigma_y T_x \Phi^{(e)}(x) = \Phi^{(e)}(x)$, míg páratlan függvényre $\sigma_y T_x \Phi^{(o)}(x) = -\Phi^{(o)}(x)$ teljesül. Továbbá igaz, hogy $[\sigma_y T_x, p_y] = 0$. Ezen kommutációs relációk alapján felírhatjuk a páros és páratlan hullámfüggvények alakját a három tartományban. A középső tartományban, azaz $|x| \leq W$ -ra és E energián a páros és páratlan függvények alakja:

$$\Phi_C^{(e)}(x) = c_1 \left[\begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} e^{iKx} - i \begin{pmatrix} e^{i\varphi} \\ -1 \end{pmatrix} e^{-iKx} \right], \quad (3.68a)$$

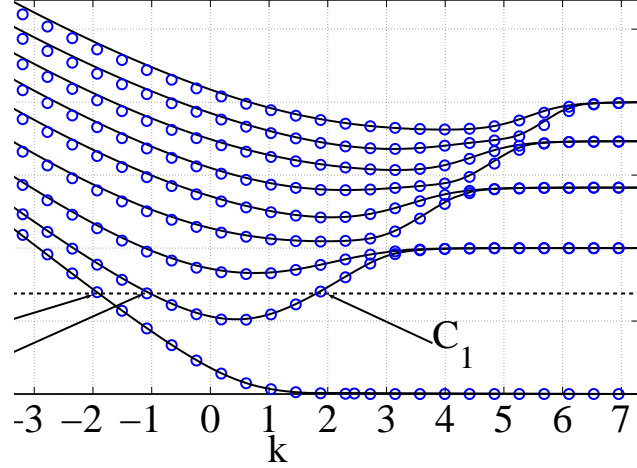
$$\Phi_C^{(o)}(x) = c_1 \left[\begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} e^{iKx} + i \begin{pmatrix} e^{i\varphi} \\ -1 \end{pmatrix} e^{-iKx} \right], \quad (3.68b)$$

ahol $\tan \varphi = k/K$, $K = \sqrt{\varepsilon^2 - k^2}$ a tranzverzális hullámszám és $\varepsilon = E/(\hbar v)$. A bal oldali részen, azaz $x \leq -W$ -ra Landau-mértékben a hullámfüggvény:

$$\Phi_L^{(e)}(x) = c_2 \begin{pmatrix} U(a_+, \xi) \\ \eta U(a_-, \xi) \end{pmatrix}, \quad \Phi_L^{(o)} = \Phi_L^{(e)}, \quad (3.68c)$$

ahol $\xi = -\sqrt{2}(x + W + kl^2)/l$, $a_{\pm} = (\pm 1 - \varepsilon^2 l^2)/2$, $\eta = -i\sqrt{2}/(\varepsilon l)$, és $U(a, x)$ a parabolikus hengerfüggvény [50] (a két független parabolikus hengerfüggvény közül azt választjuk, amelyik zérushoz tart, ha $x \rightarrow -\infty$). A jobb oldali részen, azaz $x \geq W$ -ra a hullámfüggvény $\Phi_L^{(e,o)}(x)$ -ból számolható $\Phi_R^{(e)}(x) = \sigma_y T_x \Phi_L^{(e)}(x)$ és $\Phi_R^{(o)}(x) = -\sigma_y T_x \Phi_L^{(o)}(x)$ egyenletek alapján. Ha $k > \varepsilon$, akkor a K tranzverzális hullámszámot a $K = -i\sqrt{k^2 - \varepsilon^2}$ tisztán képzetes mennyiségre kell cserélni. A c_1 és c_2 ismeretlen amplitúdók a határfeltételekből határozhatók meg. A határfeltételek szerint a hullámfüggvény folytonos az $x = \pm W$ határokon. Ez két homogén egyenletet jelent a hullámfüggvényekben szereplő c_1 és c_2 ismeretlen amplitúdókra. Így a nemtriviális megoldás a szekuláris egyenletből számolható, amiből az $E_n(k)$ energiasávokat kapjuk, ahol $n = 0, \pm 1, \dots$ adott k értékre. A $\sigma_z H_{\pm} \sigma_z = -H_{\pm}$ királis szimmetria miatt $E_{-n}(k) = -E_n(k)$ [186].

A számításokat elvégeztük numerikusan szoros kötésű közelítésben (tight binding approximation, innentől röviden TB) is⁷. A 3.15 ábrán összehasonlítottuk az $E_n(k)$ energiasávokat, melyeket a Dirac-egyenletből, illetve a TB közelítésben végzett számolásból kaptunk. Az energiát $\hbar\omega_c$ egységekben adtuk meg, ahol $\hbar\omega_c = \sqrt{2}\hbar v/l = \sqrt{3/2}\gamma a/l$. Az ábrán a szélállapotok, másnéven felületi állapotok (angolul edge states) nem láthatók, ezeket később diszkutáljuk. Jól látható, hogy a kétféle számolás ered-



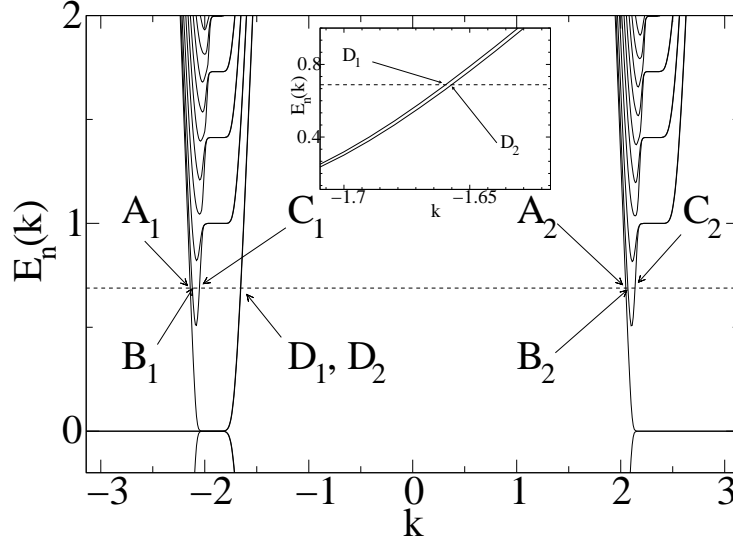
3.15. ábra. Az $E_n(k)$ energiasávok ($\hbar\omega_c$ egységekben) a k hullámszám ($1/W$ egységekben) függvényében a \mathbf{K} pont körül olyan B mágneses tér értéknél, melyre $W/l = 2.2$. A folytonos vonal a Dirac-egyenletből, az üres körök a TB közelítésből kapott eredmények. Csak a vezetési sáv energiáit ($E_n(k) \geq 0$, ahol $n = 0, 1, \dots, 8$) ábrázoltuk. A legalacsonyabb energiasáv az $n = 0$ -nak felel meg, és a többi sávok energiában növekvő sorrendben következnek. A páros (páratlan) hullámfüggvények a páros (páratlan) n kvantumszámoknak felelnek meg. Az A_1 , B_1 és C_1 állapotok a $0,688 \hbar\omega_c$ energiájú (pontosított vonal) kígyóállapotok (lásd a szöveget).

ménye kitűnően egyezik. Nagy pozitív k -ra az összes állapot egy diszperziótlan energiszintbe tendál, ezek éppen a homogén mágneses térben kialakuló kétszeresen degenerált $E_n^L(k)$ Landau-szintek, melyeket a (3.33) egyenletben adtunk meg [185, 186]. Ugyanakkor, negatív k -ra az energiasávok diszperzívek. Ilyenek például a 3.15 ábrán látható A_1 , B_1 és C_1 állapotok. Mindegyik állapot visz áramot vagy az $+y$ vagy a $-y$ irányban az adott állapotnak megfelelő csoportsebesség irányától függően. Ezek az állapotok a minta középső részén lokalizálódnak, amint ezt később számolással is indokoljuk (lásd a 3.17 ábrát). Ezek az úgynevezett kígyóállapotok.

A 3.15 ábrán látható eredmények végtelen széles mintára vonatkoznak, azaz $L = \infty$ -re. Első pillantásra ez az eredmény ellentmondó, hiszen azoknak az állapotoknak a száma, melyek fölfelé ($+y$ irányban), illetve amelyek lefelé ($-y$ irányban) haladnak nem azonos. A rendszer alapállapota úgy tűnik, hogy instabil, egy nettó áram folyik $-y$ irányban még egyensúlyban is, mindenféle külső hatás ellenére. Nyilvánvalóan ilyen helyzet nem fordulhat elő. Az ellentmondás feloldása az $x = \pm L/2$ széleken lokalizálódott állapotokban, az ún. szélállapotokban (felületi állapotokban) keresendő.

⁷Csak a legközelebbi szomszédok kölcsönhatásait vettük figyelembe. A minta $x = \pm L/2$ szélei cikk-cakk típusúak. Az eredményeink nem függenek a szélek jellegétől, ha $L \gg W$. A mágneses teret a szokásos Peirels-helyettesítéssel vettük számításba, hasonlóan Wakabayashi és munkatársai munkájában, kivéve, hogy ők homogén mágneses teret vettek [241]. A numerikus számolásainkban $W = L/10$ volt, és $N = 500$ rácspontot vettünk x irányban, azaz $L = (\sqrt{3}N/2 - 1)a$.

A 3.16 ábrán ugyanazok a TB közelítésben végzett számolásból kapott energiasávok láthatók, mint a 3.15 ábrán, csak most a megengedett összes k -ra felrajzoltuk a diszperziós görbéket. Két extra sáv jelent meg, a pontozott vonalnak megfelelő $0,688 \hbar\omega_c$ nagyságú energián ezek a D_1 és D_2 állapotok (igaz ezeket nehéz megkülönböztetni a választott paraméterek miatt, csak az ábra kinagyított részletén látható a különbség). Megmutatjuk, hogy ezek a nemdegenerált állapotok a minta véges x irányú mérete miatt lépnek fel, és az $+y$ irányban, a minta két szélén lokalizálva visznek áramot. Az

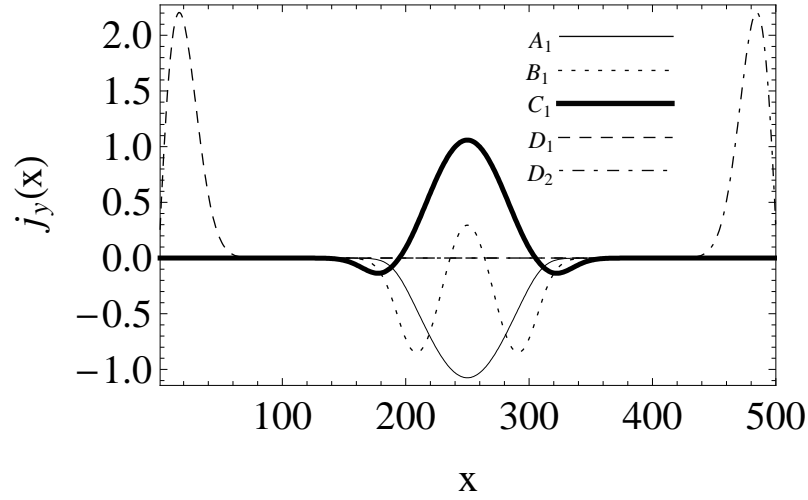


3.16. ábra. Az $E_n(k)$ diszperziós reláció az összes megengedett k -ra ($1/W$ egységekben) berajzolva egy kis részt a vegyérték kötési sávból is (ahol $E_n(k) < 0$). Az ábrabetét a fő ábra kinagyított részlete a D_1 és D_2 állapotok környékén. A paraméterek ugyanazok, mint a 3.15 ábrán a TB közelítésben végzett számolásnál. A pontozott vonallal jelzett energián nyolc állapot van: A_i , B_i , C_i és D_i , ahol $i = 1, 2$ (lásd a szöveget).

ábrán az $A_{1,2}$, $B_{1,2}$, és $C_{1,2}$ állapotok kígyóállapotok. A $C_{1,2}$ állapot $+y$ irányban visz áramot, míg a többi a $-y$ irányban. Véges L -re a felületi állapotok által vitt áramokat a kígyóállapotok árama kompenzálja. Világosan látszik, hogy minden energián a minta véges volta miatt megjelenő felületi állapotok következtében a fölfelé és lefelé haladó állapotok száma azonos, a rendszer egyensúlyban van. Ugyanezt várjuk, ha a Dirac-egyenletből indulnánk ki és figyelembe vennénk, hogy a minta véges x irányban (a felületi állapotokat Brey és Fertig, illetve Abanin munkatársai is vizsgálták [166]).

A kígyóállapotok és a felületi állapotok jobb megértése érdekében kiszámoltuk ezen állapotokhoz tartozó áramsűrűség eloszlását, melyet a 3.17 ábra mutat. Az ábrából látható, hogy az A_1 és B_1 állapotok a $-y$, míg a C_1 állapot ellentétes irányban visz áramot. Továbbá, ezek az állapotok valóban a minta közepére koncentrálnak. A D_1 (D_2) állapotok felületi állapotok, és az áram az $+y$ irányban, közel a minta bal (jobb) széle mentén áramlik. A \mathbf{K} és \mathbf{K}' pontok szerint degeneráció miatt az A_2 , B_2 és C_2 kígyóállapotok ugyanúgy viselkednek, mint az A_1 , B_1 és C_1 kígyóállapotok.

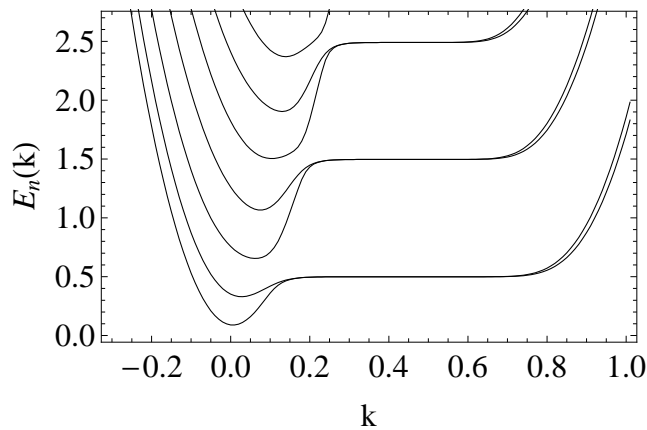
Az E_F Fermi-energiát változtatva ezen állapotokhoz tartozó árameloszlás lényegesen megváltozik. A 3.15 ábrából világos, hogy ha a Fermi-energia az első és a második Landau-szint között van, azaz $E_0^L(k) < E_F < E_1^L(k)$, akkor a B_1 és C_1 kígyóállapotok teljes árama együttesen zérust adnak, ezek az állapotok lokálisan kompenzálódnak.



3.17. ábra. Az $j_y(x)$ áramsűrűség eloszlása (önkényes egységekben) az x függvényében a 3.16 ábrán jelölt A_1 , B_1 , C_1 , D_1 és D_2 állapotokra. Itt x rácscellákban mérve 1 és N között változik, ahol $N = 500$.

Ezzel ellentétben az A_1 kígyóállapot lokálisan kompenzálatlan, hiszen csak a D_1 felületi állapot árama tudná kompenzálni, de ez az áram távol, a minta szélén folyik. Az A_1 és D_1 állapotok átfedése elhanyagolható, ezért alapállapotban, nagy méretskálán egy áram inhomogenitás lép fel. Amikor a Fermi-energia átmegy az $n = 1$ Landau-szinten, nemcsak az A_1 , de a B_1 kígyóállapot is lokálisan kompenzálatlanná válik, míg a C_1 állapot fokozatosan felületi állapottá alakul át. Így azt mondhatjuk, hogy grafénben minden Fermi-energián létezik legalább egy lokálisan kompenzálatlan kígyóállapot, amelynek árama a minta közepére koncentrálódva folyik, és csak a középső tartománytól távol, a minta szélén folyik vissza, mint egy felületi állapot árama.

Hasznos összehasonlítani ezeket az eredményeket azzal, amit kétdimenziós elektronvezetőben (2DEG) kapnánk ugyanolyan mágneses tér mellett, mint amilyen a 3.14 ábrán látható. A 3.18 ábrából jól láthatók a Landau-szintek $E_n(k) = \hbar\Omega_c(n + 1/2)$



3.18. ábra. Az $E_n(k)$ energiasávok 2DEG-ben TB közelítésben számolva a 3.14 ábrán látható mágneses tér profil és nagyság esetén. Az energiát $\hbar\Omega_c$ egységben adtuk meg, ahol $\Omega_c = eB/m^*$ a ciklotron frekvencia, m^* az elektron effektív tömege. A k hullámszám egysége $1/a$, ahol a a négyzetrács rácscellájának mérete. $W = L/10$ és $L = 200a$ értékekkel számoltunk.

energiákon ($n = 0, 1, \dots$), ahogy ezt homogén tér esetén várjuk. A grafénhez hasonlóan itt is találunk kígyóállapotokat, illetve felületi állapotokat⁸. A diszperziós reláció jellegéből látszik, hogy 2DEG-ben az első Landau-szint ($n = 0$) alatt nincs lokálisan kompenzálatlan áram. Ez a legfontosabb különbség a grafén és a kétdimenziós elektrongáz között.

Összefoglalva, tanulmányoztuk az elektron dinamikáját grafénben, ha a mágneses tér inhomogén. Egyszerű lépcsőszerű mágneses tér változás esetén megmutattuk, hogy megjelennek lokálisan kompenzálatlan áramok. Kiszámoltuk az energiasávokat mind a Dirac-egyenletből, mind szoros kötésű közelítésben, és kitűnő egyezést kaptunk. Megmutattuk továbbá, hogy alapállapotban annak feltétele, hogy ne legyen nettó áram, figyelembe kell venni a minta véges voltát keresztirányban. Ellentétben a kétdimenziós elektrongázzal, grafénben az áramot illetően minden Fermi-energián létezik legalább egy lokálisan kompenzálatlan kígyóállapot. Ez egyértelmű következménye annak, hogy az elektron dinamikáját a zérus tömegű Dirac-egyenlet írja le. A kvantum Hall-effektussal analóg módon azt várjuk, hogy a kígyóállapotok által vitt áram alacsony Fermi-energián (az $n = 0$ és $n = 1$, vagy $n = -1$ Landau-szintek között) a szennyezőkre nem érzékeny. Azt reméljük, hogy a kígyóállapotok különös viselkedése grafénben, inhomogén mágneses térben kiaknázzható a jövőbeni kísérletek során. A kígyóállapotok jobb megértése céljából nemrégén szemiklasszikus módszerekkel is elkezdtek vizsgálni az elektronok mozgását inhomogén mágneses térben [A23].

⁸2DEG-ben a kígyóállapotokra hasonló eredmény ismert az irodalomban, lásd például Reijniers és Peeters cikkét a [234] hivatkozásban.

Konkluzió

Ebben a dolgozatban három kutatási területtel kapcsolatos eredményeimet foglaltam össze. Az első fejezetben a normál-szupravezető hibrid rendszereket vizsgáltam, ahol a normál tartomány vagy kétdimenziós elektrongáz, vagy ferromágneses anyag. A második fejezetben a spintronikai rendszereket tanulmányoztam, és végül az utolsó fejezetben a grafénnel kapcsolatos eredményeimet ismertettem. Ez a három kutatási terület látszólag különálló fejezetei a nanofizikának, mégis sok bennük a közös vonás. Egyrészt mindegyik rendszer mérete néhány száz nanométer nagyságrendjébe esik, és emiatt elméletileg csak kvantumosan vizsgálhatók. Másrészt az esetek többségében a rendszer Hamilton-operátora 2×2 -es mátrixszal írható le. A kétdimenziós elektrongázhoz képest ezekben a rendszerekben egy újabb szabadsági fok jelenik meg. Például a normál-szupravezető hibrid rendszerekben ezek az elektron-lyuk állapotok, a Rashba-féle félvezető-spintronikai rendszerekben a kétféle spinbeállítás, míg egyrétegű grafénben az elemi cellában lévő két bázisatom miatt lép fel a két szabadsági fok.

Az első fejezetben különböző hibrid rendszerek energiaspektrumát vizsgáltuk kvantumosan és szemiklasszikus közelítéssel. A két vizsgált mezoszkopikus hibrid rendszer a normál-szupravezető és a ferromágnes-szupravezető elemekből állt. Vizsgáltuk a normál-szupravezető diszk rendszert mágneses térben is. Az egyes rendszerek közös jellemzője, hogy az energiaspektrumot a Bogoliubov–de Gennes-egyenlet sajátértékei adják, melyek a határfeltételekből levezetett szekuláris egyenlet gyökei. A normál-szupravezető rendszereket aszerint osztályoztuk, hogy a Bogoliubov–de Gennes-egyenlet sajátfüggvénye szeparálható vagy nem. Az 1.2 a-b ábrákon látható box és diszk geometriájú rendszerek szeparálhatók, míg az 1.2 c-e ábrákon látható hibrid rendszereknél a hullámfüggvényt csak egy alkalmas bázisban kifejtve határozhatjuk meg. Megadtuk az egyes rendszerekre érvényes szekuláris egyenlet alakját. Szemiklasszikus leírásban azt használtuk ki, hogy az Andreev-reflexió miatt minden olyan pálya, ami eléri a a normál-szupravezető határfelületet az periódikus. Így a Bohr-Sommerfeld kvantálási feltételből határozhatjuk meg az energiaszinteket. A különböző normál-szupravezető rendszerekre nagyon jó egyezést kaptunk a kétféle számolásból. A szemiklasszikus kép alapján sikerült értelmezni az energiaspektrum fontosabb vonásait. Megmutattuk, hogy azokban a normál-szupravezető rendszerekben, melyekben a $P(s)$ klasszikus visszatérési valószínűségnek felső levágása van, mindig kialakul egy minigap. Így kaotikus normál-szupravezető rendszerek esetében is kialakulhat minigap.

A mágneses térbe helyezett normál-szupravezető diszk rendszer energiaszintjeiből meghatározható a szuszceptibilitás, ami aztán összehasonlítható a legutóbbi, anomálisnak tekinthető mérési eredményekkel. Az eddigi elméleti magyarázatok távolról sem kielégíthetők. Így a dolgozatban közölt eredmények kiindulópontjai lehetnek a mérési eredmények elméleti értelmezésében. Viszonylag nagy mágneses térben a szemi-

klasszikus eredményeink jól egyeznek az egzakt kvantumos számolásokkal. Azonban numerikus okok miatt kis mágneses térben csak a szemiklasszikus módszer használható. Remélhetőleg az így kapott energiszintekből a mért szuszceptibilitást sikerül értelmezni a későbbiekben.

Az utóbbi időben intenzív kutatás tapasztalható a ferromágnes-szupravezető hibrid rendszereket illetően is. A korábbi munkákban nem vizsgálták a szemiklasszikus eredmények érvényességét. Modellszámítás érdekében a box geometriát használtuk. Sikerült levezetni az irodalomban ismert összefüggést a rendszer állapotsűrűségére. Az energiaszinteket egzakt kvantumos számolással is meghatároztuk és nagyon jó egyezést kaptunk a szemiklasszikus közelítésből kapott eredményekkel. Azonban a kicserélődési energia növelésével az egyezés elromlik. A közelítés csak akkor ad jó eredményt, ha a kicserélődési energia jóval kisebb a Fermi-energiánál.

A dolgozatban bemutattuk, hogyan terjeszthetjük ki a jól ismert szemiklasszikus módszereket hibrid rendszerekre. A kidolgozott szemiklasszikus kvantálás hatékonyságát számos rendszerre vizsgáltuk az egzakt kvantumos számolás összevetésével. Minden esetben jó egyezést kaptunk a kétféle számolásból. Az egyezés elsősorban azon múlott, hogy a szemiklasszikus számolásban figyelembe vettük azt, hogy az Andreev-reflexió során fellépő fázisugrás függ az energiától. Az itt ismertetett módszerek lehetőséget nyújthatnak a hibrid rendszerek további vizsgálatához is.

A második fejezetben a spintronika rendszerekkel kapcsolatos eredményeimet mutattam be. A bevezető rész után a Rashba-biliárdok energiaszintjeit tanulmányoztam, és a spinfüggő szórási jelenségeket. A Rashba-biliárdok energiaszintjeit például az állapotsűrűségeen keresztül lehet jellemezni. Ilyen jellegű számolást tudomásunk szerint először mi végeztünk. Kiszámoltam tetszőleges alakú Rashba-biliárdra az állapotsűrűség Weyl-sorát, azaz a vezető rendű tagjait. Kimutattuk, hogy a kétdimenziós elektrongázhoz hasonlóan, ezek a biliárd területével, illetve a kerületével arányosak. Rashba-biliárdoknál az energia-spektrumnak van negatív energiás része is. A spektrum állapotsűrűsége jelentősen eltér a pozitív, illetve negatív energiákra. A tetszőleges alakú Rashba-biliárdokra vonatkozó eredményeink az egyetlen integrálható, és ezért analitikusan kezelhető esetben, a kör alakú Rashba-biliárdra ellenőrizhetők is. Mivel a rendszer integrálható, az energiszinteket meghatározó szekuláris egyenletet sikerült analitikus formában megadni. Így a szekuláris egyenlet gyökeit, a kör alakú Rashba-biliárd energiszintjeit, numerikusan egzaktul meg lehetett határozni. Kiszámoltuk az egzakt Green-függvényt is kör alakú Rashba-biliárdra, ami alapján az állapotsűrűség is számolható. A szokásos Green-függvényes technika abban különbözik a kétdimenziós elektrongáznál alkalmazott módszertől, hogy Rashba-biliárdokra a Green-függvény valójában egy 2×2 -es mátrix. Az állapotsűrűség Weyl-sorának vezető rendű tagjai megegyeznek a tetszőleges alakú Rashba-biliárdokra kapott kifejezésekkel. Ugyanakkor, kör alakú Rashba-biliárdra további, elliptikus integrálokat tartalmazó, korrekciós tagok is fellépnek a Weyl-sorban. Megmutattuk, hogy ezek nélkül a korrekciós tagok nélkül nem kapjuk vissza az állapotsűrűség helyes energiafüggését. Negatív energiákra az állapotsűrűségben bizonyos energiákon szingularitások lépnek fel. Analitikus formulát vezettünk le a szingularitási helyekre, és az állapotsűrűsége is. A kapott állapotsűrűséget összehasonlítva az egzaktnak tekinthető numerikus eredményekkel kitűnő egyezést kaptunk kör alakú Rashba-biliárdokra.

A Rashba-biliárdokkal kapcsolatos eredményeink felhasználhatók a spinfüggő szórási jelenségek tanulmányozására is. A következő szakaszban Rashba-féle spintro-

nikai rendszerekben vizsgáltuk a spinfüggő szórási folyamatokat. Az analitikus módszerünk a hagyományos, a kvantummechanika könyvekből jól ismert parciális hullámok módszerének kétkomponensű hullámfüggvényekre való kiterjesztésén alapul. Megmutattuk, hogy a kezdetben spin szerint polarizálatlan elektronnyaláb jól tervezett spintronikai eszközben való szóródása során bizonyos szórási szögek irányában szinte teljesen polarizálttá válik. Megmutattuk továbbá, hogy a spinpolarizált elektronnyaláb az előre szórás irányához közel, egy néhány fokos szögtartományban egyrészt spinpolarizált, másrészt a differenciális szórási hatáskeresztmetszet jóval nagyobb, mint más szórási szögekre. Ez az eredmény fontos lehet annak a kísérletileg még meg nem valósított, de a spintronikai területének fejlődése szempontjából alapvetőnek számító feladatnak a megoldásában, hogy hogyan lehet spin szerint polarizált elektronokat előállítani.

A harmadik fejezetben a grafénnel kapcsolatos kutatási eredményeimet foglaltam össze. A grafén kutatása viszonylag újkeletű, nagyjából négy éve indult meg ez, az azóta nagyon intenzíven kutatott terület. Így szükségesnek tartottam egy hosszabb bevezetőt írni erről a témáról, ami remélhetőleg majd jól hasznosítható az egyetemi oktatásban is. A kutatással kapcsolatos eredményeimet három alfejezetben foglaltam össze. Az első alfejezetben egy újszerű, grafénben fellépő elektron-optikai jelenséget vizsgáltam, a második alfejezetben a minimális vezetőképességgel összefüggő számolásainkat, míg a harmadik alfejezetben a kétdimenziós elektrongázban már jól ismert kígyóállapotok grafénben megfigyelt eltérő sajátosságait ismerttettem.

Grafénben az elektron-optikai jelenségeket a negatív törésmutató létezése teszi egzotikussá. Kimutattuk, hogy grafénben megfelelő kapufeszültséggel olyan félvezetőkhöz hasonló p-n átmenet valósítható meg, melynek hatásán az elektronhullám úgy törik meg, mintha a törésmutató negatív lenne. Kiszámoltuk a bejövő síkhullám szóródását kör alakú p-n átmenetnél, azaz a hullámfüggvényt a kör alakú tartományon belül és kívül. Kiderült, hogy a körön belüli részben a geometriai optikából ismert kausztikák keletkeznek. Kiszámoltuk a kausztikák görbét analitikusan, és összehasonlítva a numerikusan egzakt számolás eredményeivel kitűnő egyezést kaptunk. Így bebizonyítottuk, hogy valóban létre lehet hozni negatív törésmutatóval jellemezhető p-n átmenetet. Ráadásul a törésmutató értékét a kapufeszültséggel könnyen változtathatjuk. Eredményeink felhasználhatók olyan p-n átmenetek tervezésében, melyekben az általunk vizsgált kör alakú p-n átmenet egyik építőköve lehet a jövőbeni grafénalapú elektron-optikai eszközöknek.

A grafén minimális fajlagos vezetőképessége ugyancsak intenzív kutatás tárgyává vált az elmúlt pár évben az elméletileg létező számtalan jóslatok és a mérési eredmények közti ellentmondásosság miatt. Ebben a kérdésben elsőként mi vizsgáltuk Kubo-formulával a minimális vezetőképességet kétrétegű grafénben. A trigonális torzulás miatt hatszor akkora értéket kaptunk, mint egyrétegű grafénben. Ugyanakkor, a trigonális torzulás elhanyagolásával ez az érték megegyezik a rétegek számával, azaz kétrétegű grafénben kétszeres. Azóta ezt az eredményt mások, más módszerrel megerősítették.

Végül a dolgozat utolsó témája a kígyóállapotok vizsgálata grafénben. Megmutattuk, hogy lépcsőszerűen változó mágneses tér esetén megjelennek lokálisan kompenzálatlan áramok. A kvantum Hall-effektussal analóg módon a kígyóállapotok által vitt áram alacsony Fermi-energián a szennyezőkre nem érzékeny, és így inhomogén mágneses térben mozgó elektronok különös viselkedése újabb kísérletekre inspirálhatja a kutatókat.

Befejezésül megemlítem, hogy egy régóta ismert jelenség, a *Zitterbewegung* a dol-

gozat három nagy fejezetében bemutatott kutatási területek egy újabb közös vonására derít fényt. A Zitterbewegung jelenségét először Schrödinger vetette fel a Dirac-egyenlettel összefüggésben [242]. Megmutatatta, hogy Heisenberg-képben a hely-operátor az állandó sebességgel mozgó Dirac-fermiont leíró tag mellett tartalmaz egy oszcilláló részt is. Korábban úgy vélték, hogy ez a jelenség egyértelműen a relativisztikus kvantummechanika következménye. Nemrégén Dávid Gyula munkatársammal megmutattuk, hogy a Zitterbewegung fellép szupravezetőkben, spintronikai rendszerekben és grafénben is, és így sikerült a Zitterbewegung jelenségének egy egységesebb elméletét kidolgoznunk [A15].

Köszönetnyilvánítás

Az itt bemutatott eredményeket néhány éves munkám során több munkatársammal, külföldi partnerrel és kezdetben diplomamunkásaimmal, majd PhD hallgatóimmal végeztem. Névszerint szeretném megemlíteni Csordás András, Dávid Gyula, Kaufmann Zoltán, Pollner Péter, Palla Gergely, Vattay Gábor munkatársaimat, illetve Joachim Burgdörfer, Colin Lambert, Florian Libisch, Stefan Rotter, Ulrich Zülicke külföldi partnereimet, akik résztvettek ebben a munkában. Az elmúlt években volt PhD hallgatóim, Béri Benjámín, Koltai János, Kormányos Andor, Pályi András, Polinák Péter és jelenlegi PhD hallgatóm, Péterfalvi Csaba állandóan és gyümölcsöző módon inspiráltak a numerikus eredmények értelmezésében és az elméleti számolásokban. Hasonlóan köszönöm Bodor András, illetve a korábbi diplomamunkásaim, Oroszlány László és Visontai Dávid, a jelenleg diplomamunkáját készítő Rakya Péter, és a TDK munkákban résztvevők, névszerint Hagymási Imre és Szécsényi István aktív közreműködését. Eredményes munkát folytattam e dolgozat témájához kevésbé kapcsolódó kutatási területen Viktor M. García-Suárez, Skon Sirichantaropass, Jaime Ferrer és Tichy Géza munkatársaimmal, illetve Kocsis Bence és Major Péter, volt PhD hallgatókkal. Igen hasznosnak bizonyult a számos szakmai konzultáció Carlo Beenakkerrel és Györffy Balázssal. Külön szeretném kifejezni köszönetemet Geszti Tamásnak és Tichy Gézának a kézirat olvasása után javasolt hasznos tanácsaikért.

A dolgozat alapját képző cikkekkel kapcsolatos munkákat anyagilag az EU V. és a VI. keretprogramon belül a Nanoscale Dynamics (HPRN-CT-2000-00144) és a Fundamentals of Nanoelectronics (504574) együttműködés, a Magyar-Brit (GB-29/01) és a Magyar-Osztrák (A-2/03) kormányközi Tét pályázat, illetve a TO25866, TO34832 és a T48782 számú OTKA pályázatok támogatták.

A dolgozathoz kapcsolódó saját publikációk

- [1] **A normál-szupravezető hibrid rendszerekkel kapcsolatos cikkek**
- [A1] J. Cserti, A. Bodor, J. Koltai and G. Vattay, 'Excitation spectra for Andreev billiards of Box and Disk geometries', Phys. Rev. B **66**, 064528 (2002).
- [A2] J. Cserti, A. Kormányos, Z. Kaufmann, J. Koltai, and C. J. Lambert, 'Proximity-induced sub-gaps in Andreev billiards', Phys. Rev. Lett. **89**, 057001 (2002).
- [A3] A. Kormányos, Z. Kaufmann, J. Cserti, and C. J. Lambert, 'Logarithmic contribution to the density of states in rectangular Andreev billiards', Phys. Rev. B **67**, 172506 (2003).
- [A4] A. Kormányos, Z. Kaufmann, C. J. Lambert, J. Cserti, 'Effective description of the gap fluctuation for chaotic Andreev billiards', Phys. Rev. B **70**, 052512-4 (2004). (Selected for *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*, September 13, 2004 issue).
- [A5] J. Cserti, P. Polinák, G. Palla, U. Zülicke, and C. J. Lambert, 'Ring-shaped Andreev billiards in quantizing magnetic fields', Phys. Rev. B **69**, 134514 (2004).
- [A6] J. Koltai, J. Cserti, and C. J. Lambert, 'Andreev bound states for a superconducting-ferromagnetic box', Phys. Rev. B **69**, 092506 (2004).
- [A7] J. Cserti, B. Béri, A. Kormányos, P. Pollner, Z. Kaufmann, 'Andreev bound states for cake shape superconducting-normal systems', J. Phys.: Condens. Matter **16**, 6737-6746 (2004).
- [A8] F. Libisch, S. Rotter, J. Burgdörfer, A. Kormányos and J. Cserti, 'Bound states in Andreev billiards with soft walls', Phys. Rev. B **72**, 075304-8 (2005).
- [A9] A. Kormányos, Z. Kaufmann, J. Cserti, and C. J. Lambert, 'Quantum-Classical Correspondence in the Wave Functions of Andreev Billiards' Phys. Rev. Lett. **96**, 237002 (2006).
- [A10] Z. Kaufmann, A. Kormányos, J. Cserti, and C. J. Lambert, 'Quantized invariant tori in Andreev billiards of mixed phase space', Phys. Rev. B **73**, 214526 (2006).
- [A11] P. K. Polinák, C. J. Lambert, J. Koltai, and J. Cserti, 'Andreev drag effect via magnetic quasiparticle focusing in normal-superconductor nanojunctions', Phys.

Rev. B **74**, 132508 (2006). (Selected for *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*, November 13, 2006 issue.)

[2] A spintronikával kapcsolatos cikkek

- [A12] J. Cserti, A. Csordás, and U. Zülicke, 'Electronic and spin properties of Rashba billiards', Phys. Rev. B **70**, 233307 (2004). (Selected for *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*, December 27, 2004 issue).
- [A13] A. Pályi, Cs. Péterfalvi, and J. Cserti, 'Two-dimensional electron scattering in regions of nonuniform spin-orbit coupling', Phys. Rev. B **74**, 073305 (2006).
- [A14] András Csordás, József Cserti, András Pályi, and Ulrich Zülicke, 'Rashba billiards', Eur. Phys. J. B **54**, 189 (2006).
- [A15] József Cserti and Gyula Dávid, 'Unified Description of the *Zitterbewegung* for Spintronic, Graphene, and Superconducting Systems', Phys. Rev. B **74**, 172305 (2006). (Selected for *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*, November 27, 2006 issue.)
- [A16] András Pályi and József Cserti, 'Skew scattering due to intrinsic spin-orbit coupling in a two-dimensional electron gas', Phys. Rev. B **76**, 035331 (2007).
- [A17] Cserti József, 'Spintronika. Egy sokat ígérő szójáték', Természet Világa, 136. évf. 9. szám (szeptember), 386-388. oldal (2005).
- [A18] Cserti József, 'Nobel-díj az ellenállásért', Természet Világa, 139. évf. 4. szám (április), 148-150. oldal (2008).

[3] A grafénnel kapcsolatos cikkek

- [A19] József Cserti, 'Minimal longitudinal dc conductivity of perfect bilayer graphene', Phys. Rev. B **75**, 033405 (2007). (Selected for *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*, January 22, 2007 issue.)
- [A20] József Cserti, András Pályi and Csaba Péterfalvi, 'Caustics due to Negative Refractive Index in Circular Graphene p - n Junctions', Phys. Rev. Lett. **99**, 246801 (2007).
- [A21] József Cserti, András Csordás, and Gyula Dávid 'Role of the trigonal warping on the minimal conductivity of bilayer graphene', Phys. Rev. Lett. **99**, 066802 (2007). (Selected for *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*, August 20, 2007 issue.)
- [A22] Péter Rakyta, László Oroszlány, Andor Kormányos, Colin J. Lambert, József Cserti, 'Theory of snake states in graphene', Phys. Rev. B. **77**, 081403(R) (2008).
- [A23] Andor Kormányos, Péter Rakyta, László Oroszlány, József Cserti, 'Bound states in inhomogeneous magnetic field in graphene: Semiclassical approach', Phys. Rev. B. **78**, 045430 (2008).

[4] **A dolgozathoz áttételesen kapcsolódó cikkek**

- [A24] G. Vattay, J. Cserti, G. Palla, G. Szálka, 'Diffraction in the semiclassical description of mesoscopic devices', *Chaos, Solitons & Fractals* **8**, 1031-1045 (1997). (Special issue in 'Chaos and Quantum Transport in Mesoscopic Cosmos', edited by K. Nakamura.)
- [A25] J. Cserti, G. Szálka, G. Vattay, 'Crossover from regular to chaotic behavior in the conductance of periodic quantum chains', *Phys. Rev. B* **57**, R15092-4 (1998).
- [A26] J. Cserti, G. Vattay, J. Koltai, F. Taddei and C. J. Lambert, 'Negative length orbits in normal-superconductor billiard systems', *Phys. Rev. Letters* **85**, 3704-3707 (2000). (Selected for *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*, Vol. 2, No. 18, Oct. 30, 2000.)
- [A27] József Cserti, 'Application of the lattice Green's function for calculating the resistance of an infinite network of resistors', *Am. J. Phys.* **68**, 896-906 (2000).
- [A28] J. Cserti, Gy. Dávid, A. Piróth, 'Perturbation of infinite networks of resistors', *Am. J. Phys.* **70**, 153-159 (2002).
- [A29] József Cserti, Géza Tichy, 'A simple model for the vibrational modes in honeycomb lattices', *Eur. J. Phys.* **25**, 723-736 (2004).
- [A30] Cserti József, 'A Chladni-féle porábráktól a nanofizikáig', *Középiskolai Matematikai és Fizikai Lapok*, **54.** évfolyam, 2004/4 (április), 236-242. oldal.
- [A31] Cserti József, *A szivárvány fizikája – I-III. Az esőcseppek fényoszórási jelenségei*, *Fizikai Szemle* **9** szám, 297 o. (2005); **10** szám, 349 o. (2005); **12** szám, 422 o. (2005).
- [A32] Bence Kocsis, Gergely Palla, and József Cserti, 'Quantum and semiclassical study of magnetic quantum dots', *Phys. Rev. B* **71**, 075331-14 (2005). (Selected for *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*, March 14, 2005 issue).
- [A33] Péter Major, Viktor M. García-Suárez, Skon Sirichantaropass, József Cserti, Colin J. Lambert, Jaime Ferrer and Géza Tichy, 'Non-universal behavior of the parity effect in monovalent atomic wires', *Phys. Rev. B* **73**, 045421-4 (2006). (Selected for *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*, January 30, 2006 issue).
- [A34] Benjámín Béri and József Cserti, 'Weak localization correction to the density of transmission eigenvalues in the presence of magnetic field and spin-orbit coupling for a chaotic quantum dot', *Phys. Rev. B* **74**, 235314 (2006). (Selected for *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*, December 25, 2006 issue.)
- [A35] Cserti József, Haiman Ottó, Huhn Andrásné, 'A szivárvány fizikai alapjai I-II', *Természet Világa*, májusi és júniusi szám, 202-205. és 258-261. oldal (2007).
- [A36] Péter Major, Géza Tichy, József Cserti, Viktor M. García-Suárez, Skon Sirichantaropass, 'The geometry dependence of the conductance oscillations of monovalent atomic chains', *Physica Status Solidi (b)* **244**, 677-684 (2007).

- [A37] Benjámín Béri and József Cserti, 'Effect of symmetry class transitions on the shot noise in chaotic quantum dots', Phys. Rev. B **75**, 041308(R) (2007). (Selected for *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*, February 12, 2007 issue.)
- [A38] László Oroszlány, Andor Kormányos, János Koltai, József Cserti, and Colin J. Lambert, 'Nonthermal broadening in the conductance of double quantum dot structures', Phys. Rev. B **76**, 045318 (2007). (Selected for the July 30, 2007 issue of *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*.)

Irodalomjegyzék

- [1] C. W. J. Beenakker and H. van Houten in *Quantum Transport in Semiconductor Nanostructures*, Solid State Physics, Vol. **44**, pp. 1-228, edited by H. Ehrenreich and D. Turnbull, (Academic Press, Inc., Boston, 1991).
- [2] *Transport Phenomena in Mesoscopic Systems*, edited by H. Fukuyama and T. Ando (Springer-Verlag, Berlin, 1992).
- [3] *Mesoscopic Quantum Physics, Les Houches Summer School*, edited by E. Akkermans, G. Montambaux, J. L. Pichard, and J. Zinn-Justin (Elsevier Science B. V., Amsterdam, The Netherlands, 1995).
- [4] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [5] P. Sheng, *Introduction to Wave Scattering, Localization, and Mesoscopic Phenomena*, (Academic Press, Inc., San Diego, California, 1995).
- [6] *Mesoscopic Electron Transport*, edited by L. L. Sohn, L. P. Kouwenhoven, and G. Schön (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1997).
- [7] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, (Oxford University Press, Oxford, England, 1997).
- [8] D. K. Ferry and S. M. Goodnick, *Transport in Nanostructures*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [9] *Quantum Mesoscopic Phenomena and Mesoscopic Devices in Microelectronics*, edited by O. Kulik and R. Ellialtıoğlu (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1999).
- [10] T. Heinzel, *Mesoscopic Electronics in Solid State Nanostructures*, (Wiley-VCH GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2003).
- [11] A. F. Andreev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **46**, 1823 (1964), [Sov. Phys. JETP, **19**, 1228 (1964)].
- [12] A. A. Abrikosov, *Fundamental of the Theory of Metals*, (Elsevier Science Publishers, Amsterdam, The Netherlands, 1988).
- [13] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity*, (McGraw-Hill, Inc., New York, 1996).

-
- [14] J. B. Ketterson and S. N. Song, *Superconductivity*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
- [15] C. J. Lambert and R. Raimondi, J. Phys. Condens. Matter **10**, 901 (1998).
- [16] C. W. J. Beenakker, in Ref. [3].
- [17] C. W. J. Beenakker, Rev. Mod. Phys. **69**, 731 (1997).
- [18] P. G. de Gennes and D. Saint-James, Phys. Lett. **4**, 151 (1963).
- [19] I. Kosztin, D. L. Maslov, and P. M. Goldbart, Phys. Rev. Lett. **75**, 1735 (1995).
- [20] J. A. Melsen, P. W. Brouwer, K. M. Frahm, and C. W. J. Beenakker, Eur. Phys. Lett. **35**, 7 (1996).
- [21] J. A. Melsen, P. W. Brouwer, K. M. Frahm, and C. W. J. Beenakker, Physica Scripta **T69**, 223 (1997).
- [22] A. Altland and M. R. Zirnbauer, Phys. Rev. Lett. **76**, 3420 (1996).
- [23] G. B. Lesovik, A. L. Fauchère, and G. Blatter, Phys. Rev. B **55**, 3146 (1997).
- [24] A. Lodder and Y. V. Nazarov, Phys. Rev. B **58**, 5783 (1998).
- [25] H. Schomerus and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **82**, 2951 (1999).
- [26] W. Ihra, M. Leadbeater, J. L. Vega, and K. Richter, Eur. Phys. J. B **21**, 425 (2001).
- [27] W. Ihra and K. Richter, Physica E **9**, 362 (2001).
- [28] I. O. Kulik, Zh. Éksp. Teor. Fiz. **57**, 1745 (1969), [Sov. Phys. JETP **30**, 944 (1970)]; J. Bardeen and J. L. Johnson, Phys. Rev. B **5**, 72 (1972).
- [29] C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **67**, 3836 (1991), [**68**, 1442, (1992) (Erratum)]; C. W. J. Beenakker, in *Transport Phenomena in Mesoscopic Systems*, edited by H. Fukuyama and T. Ando (Springer-Verlag, Berlin, 1992), pp. 235–253.
- [30] P. F. Bagwell, Phys. Rev. B **46**, 12573 (1992).
- [31] O. Šipr and B. L. Györfy, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 169 (1996); O. Šipr and B. L. Györfy, J. Low. Temp. Phys. **106**, 315 (1997).
- [32] H. Hoppe, U. Zülicke, and G. Schön, Phys. Rev. Lett. **84**, 1804 (2000).
- [33] *Chaos and Quantum Physics, Les Houches Summer School*, edited by M.-J. Giamboni, A. Voros, and J. Zinn-Justin (Elsevier Science B. V., Amsterdam, The Netherlands, 1991).
- [34] K. Nakamura, *Quantum Chaos, a new paradigm of nonlinear dynamics*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1993).

- [35] H.-J. Stöckmann, *Quantum Chaos, An Introduction*, (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [36] P. G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* (Benjamin, New York, 1996).
- [37] W. L. McMillan, Phys. Rev. **175**, 559 (1968); G. Kieselmann, Phys. Rev. B **35**, 6762 (1987).
- [38] H. Plehn, O.-J. Wacker and R. Kümmel, Phys. Rev. B **49**, 12140 (1994).
- [39] G. E. Blonder, M. Tinkham, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **25**, 4515 (1982).
- [40] Y. Asano and T. Kato, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 1125 (2000).
- [41] H. Weyl, Göttinger Nachrichten Akad. Wiss. **110**, 114 (1911).
- [42] H. T. Baltes and E. R. Hilf, *Spectra of Finite Systems* (Bibliographisches Institut Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1976);
- [43] M. Kac, Am. Math. Monthly **73**, 1 (1966).
- [44] R. Balian and C. Bloch, Ann. Phys. (N.Y.) **60**, 401 (1970);
- [45] K. Stewartson and R. T. Waechter, Proc. Cambridge Philos. Soc. **69**, 581 (1971).
- [46] *Chaos and Quantum Physics*, ed. by M.-J. Giannoni, A. Voros and J. Zinn-Justin (Elsevier Science Publishers B.V., Amsterdam, The Netherlands, 1991). (Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 1991).
- [47] M. Berry and C.J. Howls, Proc. R. Soc. Lond. A **447**, 527 (1994).
- [48] M. Sieber, H. Primack, U. Smilansky, I. Ussishkin, and H. Schanz, J. Phys. A **28**, 5041 (1995).
- [49] M. Brack and R. K. Bhaduri, *Semiclassical Physics* in Frontiers in Physics, edited by D. Pines, (Addison-Wesley Pub. Co., Inc., Amsterdam, 1997).
- [50] M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, 9th ed. (Dover Publication Inc., New York, NY, 1972).
- [51] M. G. Vavilov, P. W. Brouwer, V. Ambegaokar, and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **86**, 874 (2001); P. M. Ostrovsky, M. A. Skvortsov, and M. V. Feigel'man, Phys. Rev. Lett. **87**, 027002 (2001); JETP Lett. **75**, 336 (2002); A. Lamacraft and B. D. Simons, Phys. Rev. B **64**, 014514 (2001); Ph. Jacquod, H. Schomerus, and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **90**, 207004 (2003); M. C. Goorden, Ph. Jacquod, and C. W. J. Beenakker, cond-mat/0306731; P. G. Silvestrov, M. C. Goorden, and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **90**, 116801 (2003); M. G. Vavilov, and A. I. Larkin, Phys. Rev. B **67**, 115335 (2003).
- [52] P. Visani, A. C. Mota, and A. Pollini, Phys. Rev. Lett. **65**, 1514 (1990); A. C. Mota, P. Visani, A. Pollini, and K. Aupke, Physica B **197**, 95 (1994); F. B. Müller-Allinger and A. C. Mota, Phys. Rev. Lett. **84**, 3161 (2000).

-
- [53] C. Bruder and Y. Imry, Phys. Rev. Lett. **80**, 5782 (1998).
 - [54] A. Fauchère, V. Geshkenbein, and G. Blatter, Phys. Rev. Lett. **82**, 1796 (1999); C. Bruder and Y. Imry, *ibid.* **82**, 1797 (1999); A. L. Fauchère, W. Belzig, and G. Blatter, *ibid.* **82**, 3336 (1999); M. Lisowski and E. Zipper, *ibid.* **86**, 1602 (2001); F. Niederer, A. L. Fauchère, and G. Blatter, Phys. Rev. B **65**, 132515 (2002).
 - [55] S. Pilgram, W. Belzig, and C. Bruder, Phys. Rev. B **62**, 12462 (2000).
 - [56] A. V. Galaktionov and A. D. Zaikin, Phys. Rev. B **67**, 184518 (2003).
 - [57] H. Takayanagi and T. Akazaki, Physica B **249-251**, 462 (1998); T. D. Moore and D. A. Williams, Phys. Rev. B **59**, 7308 (1999); D. Uhlisch *et al.*, *ibid.* **61**, 12463 (2000).
 - [58] Y. Takagaki, Phys. Rev. B **57**, 4009 (1998); Y. Ishikawa and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 954 (1999); Y. Asano, Phys. Rev. B **61**, 1732 (2000); N. M. Chtchelkatchev, JETP Lett. **73**, 9497 (2001).
 - [59] L. D. Landau, E. M. Lifsic, *Elmélet fizika III. kötet: Kvantummechanika, Nem-relativisztikus elmélet* (Tankönyvkiadó, Budapest, 1984).
 - [60] L. Solimany and B. Kramer, Solid State Comm. **96**, 471 (1995).
 - [61] S. Klama, J. Phys.: Condens. Matter **5**, 5609 (1993).
 - [62] L. A. Falkovsky and S. Klama, J. Phys.: Condens. Matter **5**, 4491 (1993).
 - [63] K. Hornberger and U. Smilansky, Phys. Rep. **367**, 249 (2002); K. Hornberger, *Spectral Properties of Magnetic Edge States*, PhD Thesis, 2001, Universität München, Germany.
 - [64] U. Zülicke, H. Hoppe and G. Schön, Physica B **298**, 453 (2001).
 - [65] M. J. M. de Jong and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **74**, 1657 (1995).
 - [66] I. Žutić and S. D. Sarma, Phys. Rev. B **60**, R16322 (1999).
 - [67] A. Kadigrobov, R. I. Shekhter, M. Jonson, and Z. G. Ivanov, Phys. Rev. B **60**, 14593 (1999).
 - [68] I. Žutić and O. T. Walls, Phys. Rev. B **61**, 1555 (2000).
 - [69] W. Belzig, A. Brataas, Yu. V. Nazarov, and G. E. W. Bauer, Phys. Rev. B **62**, 9726 (2000).
 - [70] F. Taddei, S. Sanvito, and C. J. Lambert, Phys. Rev. B **63**, 012404 (2000).
 - [71] K. Kikuchi, H. Imamura, S. Takahashi, and S. Maekawa, Phys. Rev. B **65**, 020508 (2001).
 - [72] M. Krawiec, B. L. Györfy, and J. F. Annett, cond-mat/0203184.
 - [73] T. Kontos, M. Aprili, J. Lesueur, and X. Gison, Phys. Rev. Lett. **86**, 304 (2001).

- [74] M. Zareyan, W. Belzig, and Yu. V. Nazarov, Phys. Rev. Lett. **86**, 308 (2001); M. Zareyan, W. Belzig, and Yu. V. Nazarov, Phys. Rev. B. **65**, 184505 (2002).
- [75] K. Halterman and O. T Valls, Phys. Rev. B. **66**, 224516 (2002).
- [76] W. Belzig, F. K. Wilhelm, C. Bruder, G. Schön and A.D. Zaikin, Superlattice Microstruct. **25**, 1251 (1999).
- [77] M. Baibich *et al.*, Phys. Rev. Lett. **61**, 2472 (1988); Binasch, et al., Phys. Rev. B **39**, 4828 (1989).
- [78] Bakonyi Imre, Simon Eszter, Péter László, *Az óriás mágneses ellenállás felfedezése (1988) - A spintronika nyitánya - a 2007. évi fizikai Nobel-díj és háttere*, Fizikai Szemle **2**, 41 (2008). Egy részletesebb, szakirodalmi hivatkozásokkal bővített változat a következő honlapon található: <http://www.szfki.hu/bakonyi/GMR-Nobel-dij.pdf>.
- [79] S. Datta, B. Das, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).
- [80] Sólyom Jenő, *A modern szilárdtestfizika alapjai I. kötet, A szilárd testek szerkezete és dinamikája*, (ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 2002).
- [81] F. Schwabl, *Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, Berlin, 1992).
- [82] E. O. Kane, J. Phys. Chem. Solids. **1**, 249 (1957).
- [83] Sólyom Jenő, *A modern szilárdtestfizika alapjai II. kötet, Elektronok a szilárd testekben*, (ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 2003).
- [84] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, (Springer, Berlin, 2003).
- [85] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (John Wiley & Sons, 1991).
- [86] J. Fabian, A. Matos-Abiague, C. Ertler, P. Stano, I. Zutic, *Semiconductor Spintronics*, Acta Physica Slovaca **57**, 565 (2007) (lásd még: arXiv:0711.1461v1).
- [87] R. Winkler. Physica E **22**, 450 (2004).
- [88] E. I. Rashba, Fiz. Tverd. Tela (Leningrad) **2**, 1224 (1960) [Sov. Phys. Solid State **2**, 1109 (1960)]
- [89] Yu. A. Bychkov and E. I. Rashba, J. Phys. C **17**, 6039 (1984).
- [90] J. Luo, H. Munekata, F. F. Fang and P. J. Stiles, Phys. Rev. B **38**, 10142 (1988); J. Luo, H. Munekata, F. F. Fang and P. J. Stiles, Phys. Rev. B **41**, 7685 (1990); G. Engels, J. Lange, T. Schäpers and H. Lüth, Phys. Rev. B **55**, 1958 (1997); J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi and T. Enoki, Phys. Rev. Lett. **78**, 1335 (1997).
- [91] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova and D. M. Treger, Science **294**, 1488 (2001).

-
- [92] S. Das Sarma, J. Fabian, X. Hu, I. Žutić, Solid State Comm. **119**, 207 (2001).
 - [93] Dirk Grundler: *Spintronics*, Physics World **15**, 39 (2002).
 - [94] *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation*, eds. D. D. Awschalom, D. Loss, N. Samarth, (Springer-Verlag, Berlin, 2002).
 - [95] I. Žutić, J. Fabian, S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).
 - [96] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova and D. M. Treger, Science **294**, 1488 (2001); *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation*, edited by D. D. Awschalom, D. Loss, and N. Samarth (Springer, Berlin, 2002); I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004); E. I. Rashba, cond-mat/0507007 (2005).
 - [97] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova and D. M. Treger, Science **294**, 1488 (2001).
 - [98] J. Schliemann, D. Loss, and R. M. Westervelt, Phys. Rev. Lett. **94**, 206801 (2005).
 - [99] J. Schliemann, D. Loss, and R. M. Westervelt, Phys. Rev. B **73**, 085323 (2006).
 - [100] S. Murakami, cond-mat/0504353; J. Sinova, S. Murakami, S.-Q. Shen, and M.-S. Choi, Solid State Comm. **138**, 214 (2006) (see also in cond-mat/0512054); J. Schliemann, Int. J. Mod. Phys. B **20**, 1015 (2006) (see also in cond-mat/0602330); H.-A. Engel, E. I. Rashba, and B. I. Halperin, cond-mat/0603306.
 - [101] R. Winkler, Phys. Rev. B **62**, 4245 (2000); M. G. Pala, M. Governale, J. König, and U. Zülicke, Europhys. Lett. **65**, 850 (2004); M. G. Pala, M. Governale, J. König, U. Zülicke, and G. Iannaccone, Phys. Rev. B **69**, 045304 (2004); J. Schliemann, and D. Loss, Phys. Rev. B **71**, 085308 (2005); M. Zarea, and S. E. Ulloa, Phys. Rev. B **73**, 165306 (2006).
 - [102] Pályi András, *Spinfüggő szórási folyamatok kétdimenziós elektronrendszerekben*, ELTE PhD dolgozat, 2008 (Témavezető: Cserti József).
 - [103] Rogerio de Sousa and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **68**, 155330 (2003).
 - [104] G. Lommer, F. Malcher, and U. Rössler, Phys. Rev. Lett. **60**, 728 (1988).
 - [105] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, and T. Enoki, Phys. Rev. Lett. **78**, 1335 (1997).
 - [106] T. Schäpers, G. Engels, J. Lange, Th. Klocke, M. Hollfelder, and H. Lüth, J. Appl. Phys. **83**, 4324 (1998).
 - [107] Y. Sato, T. Kita, S. Gozu, and S. Yamada, J. Appl. Phys. **89**, 8017 (2001).
 - [108] F. Mireles and G. Kirczenow, Phys. Rev. B **64**, 024426 (2001).
 - [109] W. Häusler, Phys. Rev. B **63**, 121310(R) (2001).

- [110] M. Governale and U. Zülicke, Phys. Rev. B **66**, 073311 (2002).
- [111] T. Schäpers, J. Knobbe, and V. A. Guzenko, Phys. Rev. B **69**, 235323 (2004).
- [112] J. Splettstoesser, M. Governale, and U. Zülicke, Phys. Rev. B **68**, 165341 (2003).
- [113] P. Földi, B. Molnár, M. G. Benedict, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **71**, 033309 (2005).
- [114] O. Voskoboynikov, C. P. Lee, and O. Tretyak, Phys. Rev. B **63**, 165306 (2001).
- [115] M. Governale, Phys. Rev. Lett. **89**, 206802 (2002).
- [116] M. Valín-Rodríguez, A. Puente, and L. Serra, Phys. Rev. B **69**, 085306 (2004).
- [117] E. N. Bulgakov and A. F. Sadreev, Phys. Rev. B **66**, 075331 (2002).
- [118] M. Valín-Rodríguez, A. Puente, and L. Serra, Phys. Rev. B, **69**, 153308(R) (2004).
- [119] C. F. Destefani, S. E. Ulloa, and G. E. Marques, Phys. Rev. B **69**, 125302(R) (2004).
- [120] O. Zaitsev, D. Frustaglia, and K. Richter, Phys. Rev. Lett. **94**, 026809 (2005).
- [121] E. N. Bulgakov and A. F. Sadreev, JETP Letters, **78**, 443 (2003); Phys. Rev. E **70**, 056211 (2004); A. I. Saichev, H. Ishio, A. F. Sadreev and K.-F. Berggren, J. Phys. A **35**, L87 (2002).
- [122] K.-F. Berggren and T. Ouchterlony, Found. Phys. **31**, 233 (2001).
- [123] I. L. Aleiner and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. Lett. **87**, 256801 (2001); J.-H. Cremers, P. W. Brouwer, and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. B **68**, 125329 (2003).
- [124] M. V. Berry and R. J. Mondragon, Proc. R. Soc. Lond. A **412**, 53 (1987).
- [125] E. N. Bulgakov and A. F. Sadreev, JETP Letters, **73**, 505 (2001).
- [126] E. Tsitsishvili, G. S. Lozano and A. O. Gogolin, Phys. Rev. B **70**, 115316 (2004).
- [127] C.-H. Chang, A. G. Mal'shukov, and K. A. Chao, Phys. Rev. B **70**, 245309 (2004).
- [128] J. D. Walls, J. Huang, R. M. Westervelt, E. J. Heller, Phys. Rev. B **73**, 035325 (2006).
- [129] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, 5th ed. (Academic Press, San Diego, 1994).
- [130] M. Berry in Ref. [46], p. 251.
- [131] Y. Décanini and A. Folacci, Phys. Rev. E **68**, 046204 (2003).
- [132] C. Schmit in Ref. [46], p. 331; A. Csordás, R. Graham, P. Szépfalusy, Phys. Rev. A **44**, 1491 (1991).

-
- [133] R. G. Littlejohn and W. G. Flynn, Phys. Rev. A **45**, 7697 (1992).
- [134] M. Pletyukhov, Ch. Amann, M. Mehta, and M. Brack, Phys. Rev. Lett. **89**, 116601 (2002); Ch. Amann and M. Brack, J. Phys. A **35**, 6009 (2002).
- [135] C. W. J. Beenakker, Rev. Mod. Phys. **69**, 731 (1997).
- [136] E. A. de Andrada e Silva, G. C. La Rocca, and F. Bassani, Phys. Rev. B **50**, 8523 (1994).
- [137] N. F. Mott and H. S. Massey, *The Theory of Atomic Collisions*, (Third ed., Oxford University Press, Oxford 1965).
- [138] B. H. Bransden and C. J. Joachain, *Introduction to Quantum Mechanics*, (Longman, New York, 1989).
- [139] L. E. Ballentine, *Quantum Mechanics* (Prentice-Hall, New Jersey 1990).
- [140] J. Schwinger, Phys. Rev. **73**, 407 (1948).
- [141] J. Nitta, F. E. Meijer, and H. Takayanagi, Appl. Phys. Lett. **75**, 695 (1999); F. Mireles and G. Kirczenow, Phys. Rev. B **64**, 024426 (2001); D. Frustaglia, M. Hentschel, and K. Richter, Phys. Rev. Lett. **87**, 256602 (2001); A. A. Kiselev and K. W. Kim, Appl. Phys. Lett. **78**, 775 (2001); T. Koga, J. Nitta, H. Takayanagi, and S. Datta, Phys. Rev. Lett. **88**, 126601 (2002); M. Governale and U. Zülicke, Phys. Rev. B **66**, 073311 (2002); M. Governale, D. Boese, U. Zülicke, and C. Schroll, Phys. Rev. B **65**, 140403(R) (2002); S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang, Science **301**, 1348 (2003); P. Středa and P. Šeba, Phys. Rev. Lett. **90**, 256601 (2003); R. Ionicioiu and I. D'Amico, Phys. Rev. B **67**, 041307(R) (2003); T. P. Pareek, Phys. Rev. Lett. **92**, 076601 (2004); P. Földi, O. Kálmán, M. G. Benedict, and F. M. Peteers, cond-mat/0507650.
- [142] G. Schmidt, D. Ferrand, L. W. Molenkamp, A. T. Filip, B. J. van Wees, Phys. Rev. B **62**, R4790 (2000).
- [143] X. F. Wang, Phys. Rev. B **69**, 035302 (2004). M. Valín-Rodríguez, A. Puente, and L. Serra, Phys. Rev. B **69**, 153308 (2004); M. Khodas, A. Shekhter, and A. Finkel'stein, Phys. Rev. Lett. **92**, 086602 (2004); H. Chen, J. J. Heremans, J. A. Peters, A. O. Govorov, N. Goel, S. J. Chung, and M. B. Santos, Appl. Phys. Lett. **86**, 032113 (2005). Q.-F. Sun and X. C. Xie, Phys. Rev. B **71**, 155321 (2005); J. I. Ohe, M. Yamamoto, T. Ohtsuki, J. Nitta, Phys. Rev. B **72**, 041308(R) (2005).
- [144] M. König, A. Tschetschetkin, E. M. Hankiewicz, Jairo Sinova, V. Hock, V. Daumer, M. Schäfer, C. R. Becker, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, Phys. Rev. Lett. **96**, 076804 (2006).
- [145] D. Grundler, Phys. Rev. Lett. **84**, 6074 (2000).
- [146] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, Phys. Rev. B **70**, 205319 (2004).

- [147] Lásd például *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation* a [96] hivatkozásban; R. de Sousa and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **68**, 155330 (2003); Th. Schäpers, J. Knobbe, and V. A. Guzenko, Phys. Rev. B **69**, 235323 (2004).
- [148] Jr-Yu Yeh, M.-Che Chang, and C.-Yu Mou, Phys. Rev. B **73**, 035313 (2006).
- [149] B. K. Nikolić and S. Souma, Phys. Rev. B **71**, 195328 (2005).
- [150] O. Voskoboynikov, H. C. Huang, C. P. Lee, and O. Trtyak, Physica E **12**, 252 (2002).
- [151] E. N. Bulgakov and A. F. Sadreev, JETP Letters, **73**, 505 (2001); E. Tsitsishvili, G. S. Lozano and A. O. Gogolin, Phys. Rev. B **70**, 115316 (2004); C.-H. Chang, A. G. Mal'shukov, and K. A. Chao, Phys. Rev. B **70**, 245309 (2004);
- [152] U. Zülicke and C. Schroll, Phys. Rev. Lett. **88**, 029701 (2002).
- [153] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl and R. E. Smalley, Nature **318**, 162 (1985).
- [154] S. Iijima, Nature **354**, 56 (1991).
- [155] R. Saito, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Physical properties of carbon nanotubes*, (Imperial College Press, London, 1998).
- [156] S. Reich, C. Thomsen, J. Maultzsch, *Carbon Nanotubes, Basic Concepts and Physical Properties*, (Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Berlin, 2004).
- [157] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, Science **306**, 666 (2004); K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, Nature **438**, 197 (2005).
- [158] Y. Zhang, J. P. Small, M. E. S. Amori, and P. Kim, Phys. Rev. Lett. **94**, 176803 (2005); Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, Nature **438**, 201 (2005).
- [159] N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [160] P. M. Chaikin and T. C. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1995).
- [161] M. I. Katsnelson, Materials Today **10**, 20 (2007).
- [162] M. I. Katsnelson and K. S. Novoselov, Solid State Commun. **143**, 3 (2007).
- [163] A. K. Geim and K. S. Novoselov, Nature Materials **6**, 183 (2007).
- [164] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim, arXiv:0709.1163v2 (megjelenés alatt a Reviews of Modern Physics folyóiratban).
- [165] C. W. J. Beenakker, *Andreev reflection and Klein tunneling in graphene*, arXiv:0710.3848v2 ("Colloquium" for Reviews of Modern Physics).

- [166] Special issue of Solid State Commun. **143**, 1 (2007).
- [167] L. Tapasztó, G. Dobrik, P. Lambin, and L. P. Biró, Nature Nanotechnology, **3**, 397 (2008).
- [168] Dobrik Gergely, *Grafén vizsgálata és nanométeres pontosságú módosítása pásztázó alagútmikroszkóp segítségével*, ELTE szakdolgozat, 2008 (Témavezetők: Dr. Biró László Péter és Dr. Tapasztó Levente).
- [169] P. R. Wallace, Phys. Rev. **71**, 622 (1947).
- [170] J. W. McClure, Phys. Rev. **108**, 612 (1957).
- [171] J. C. Slonczewski, and P. R. Weiss, Phys. Rev. **109**, 272 (1958).
- [172] S. Reich, J. Maultzsch, and C. Thomsen, Phys. Rev. B **66**, 035412 (2002).
- [173] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College, Philadelphia, PA, 1976).
- [174] A. Bostwick, T. Ohta, T. Seyller, K. Horn, E. Rotenberg, Nature Physics **3**, 36 (2007) (lásd még: arXiv:cond-mat/0609660v1).
- [175] A. Bostwick, T. Ohta, J. L. McChesney, K. V. Emtsev, T. Seyller, K. Horn, E. Rotenberg, New J. Phys. **9**, 385 (2007) (lásd még: arXiv:0705.3705v1).
- [176] J. W. McClure, Phys. Rev. **104**, 666 (1956).
- [177] D. P. DiVincenzo and E. J. Mele, Phys. Rev. B **29**, 1685 (1984).
- [178] T. Ando, T. Nakanishi and R. Saito, J. Phys. Soc. Japan, **67**, 2857 (1998).
- [179] W. W. Toy, M. S. Dresselhaus and G. Dresselhaus, Phys. Rev. **109**, 272 (1958).
- [180] O. Klein, Z. Phys., **53**, 157 (1929).
- [181] F. Constantinescu és E. Magyari, *Kvantummechanika, Feladatok*, (Tankönyvkiadó, Budapest, 1972).
- [182] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, A. K. Geim, Nature Phys. **2**, 620 (2006).
- [183] V. V. Cheianov, V. I. Fal'ko, and B. L. Altshuler, Science **315**, 1252 (2007).
- [184] V. V. Cheianov and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. B. **74**, 041403(R) (2006).
- [185] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988); Y. Zheng and T. Ando, Phys. Rev. B **65**, 245420 (2002); V. P. Gusynin and S. G. Sharapov, Phys. Rev. Lett. **95**, 146801 (2005); N. M. R. Peres F. Guinea and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. B **73**, 125411 (2006); L. Brey and H. A. Fertig, Phys. Rev. B **73**, 235411 (2006).
- [186] M. Ezawa, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 094701 (2007) (lásd még: arXiv:0707.0353).

- [187] *The Quantum Hall Effect*, edited by R.E.Prange and S.M.Girvin, (Springer-Verlag, New York, 1987). Fazekas Patrik, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism* (Singapore: World Scientific Publisher, 1999, Series in Modern Condensed Matter Physics; 5.)
- [188] Fazekas Patrik, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism* (Singapore: World Scientific Publisher, 1999, Series in Modern Condensed Matter Physics; 5.)
- [189] E. Fradkin, Phys. Rev. B **63**, 3263 (1986); P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **71**, 1887 (1993); E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, V. A. Miransky, and I. A. Shovkovy, Phys. Rev. B **66**, 045108 (2002).
- [190] K. Ziegler, Phys. Rev. Lett. **97**, 266802 (2006).
- [191] L. A. Falkovsky and A. A. Varlamov, cond-mat/0606800.
- [192] K. Nomura and A. H. MacDonald, Phys. Rev. Lett. **98**, 076602 (2007).
- [193] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov, Phys. Rev. Lett. **95**, 146801 (2005).
- [194] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov, Phys. Rev. B **73**, 245411 (2006).
- [195] N. M. R. Peres, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. B **73**, 125411 (2006).
- [196] M. I. Katsnelson, Eur. Phys. J. B **51**, 157 (2006).
- [197] P. M. Ostrovsky, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin, Phys. Rev. B **74**, 235443 (2006).
- [198] J. Tworzydło, B. Trauzettel, M. Titov, A. Rycerz, C.W.J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **96**, 246802 (2006).
- [199] S. Ryu, C. Mudry, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, Phys. Rev. B **75**, 205344 (2007).
- [200] F. Miao, S. Wijeratne, Y. Zhang, U.C. Coskun, W. Bao, and C.N. Lau, Science **317**, 1530 (2007).
- [201] R. Danneau, F. Wu, M. F. Craciun, S. Russo, M. Y. Tomi, J. Salmilehto, A. F. Morpurgo, and P. J. Hakonen, Phys. Rev. Lett. **100**, 196802 (2008) (for extended version see arXiv:0807.0157).
- [202] A. R. Akhmerov and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. B **77**, 085423 (2008).
- [203] Visontai Dávid, *Transzportfolyamatok grafénban*, ELTE szakdolgozat, 2008.
- [204] Koltai János, *Hibrid rendszerek transzport tulajdonságai*, ELTE PhD dolgozat, 2004.
- [205] V. G. Veselago, Sov. Phys. Usp. **10**, 509 (1968).

-
- [206] J. B. Pendry, Phys. Rev. Lett. **85**, 3966 (2000); J. B. Pendry, Nature **423**, 22 (2003); D. R. Smith, J. B. Pendry, and M. C. K. Wiltshire, Science **305**, 788 (2004).
- [207] R. A. Shelby, D. R. Smith, S. Schultz, Science **292**, 77 (2001); A. A. Houck, J. B. Brock, I. L. Chuang, Phys. Rev. Lett. **90**, 137401 (2003); C. G. Parazzoli, R. B. Gregor, K. Li, B. E. C. Koltenbah, M. Tanielian, Phys. Rev. Lett. **90**, 107401 (2003); M. Notomi, Phys. Rev. B **62**, 10696 (2000); C. Luo, S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos, J. B. Pendry, Opt. Express **11**, 746 (2003).
- [208] Márk Géza István, Bálint Zsolt, Kertész Krisztián Vértessy Zofia, Biró László Péter, *A biológiai eredetű fotonikus kristályok csodái*, Fizikai Szemle **4**, 116 (2007).
- [209] M. V. Berry, and C. Upstill: *Catastrophe Optics: Morphologies of Caustics and Their Diffraction Patterns*, in *Progress in Optics*, edited by E. Wolf (North-Holland, 1980), pp. 257-346.
- [210] M. Hentschel, and F. Guinea, Phys. Rev. B **76**, 115407 (2007); M. I. Katsnelson, and A. K. Geim, Phil. Trans. R. Soc. A **366**, 195 (2008).
- [211] P. Vodo, P. V. Parini, W. T. Lu, and S. Sridhar, Appl. Phys. Lett. **86**, 201108 (2005).
- [212] E. Hecht, *Optics* (4th edition) (Addison-Wesley, Amsterdam, 2002).
- [213] B. Huard, J. A. Sulpizio, N. Stander, K. Todd, B. Yang, and D. Goldhaber-Gordon, Phys. Rev. Lett. **98**, 236803 (2007).
- [214] K. S. Novoselov, E. McCann, S. V. Morozov, V. I. Fal'ko, M. I. Katsnelson, U. Zeitler, D. Jiang, F. Schedin, A. K. Geim, Nature Physics **2**, 177 (2006).
- [215] E. McCann and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. Lett. **96**, 086805 (2006).
- [216] E. McCann, Phys. Rev. B **74**, 161403(R) (2006).
- [217] J. Nilsson, A. H. Castro Neto, F. Guinea, and N. M. R. Peres, Phys. Rev. B **78**, 045405 (2008).
- [218] E. V. Castro, et al., Phys. Rev. Lett. **99**, 216802 (2007).
- [219] T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, Science **313**, 951 (2006).
- [220] D. S. L. Abergel and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. B **75**, 155430 (2007).
- [221] J. Nilsson and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. Lett. **98**, 126801 (2007).
- [222] J. M. Pereira, Jr. P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, Nano Lett. **7**, 946 (2007).
- [223] T. Ludwig, Phys. Rev. B **75**, 195322 (2007).
- [224] M. Koshino and T. Ando, Phys. Rev. B **73**, 245403 (2006).

- [225] B. Partoens and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **74**, 075404 (2006).
- [226] M. I. Katsnelson, Eur. Phys. J. B **52**, 151 (2006).
- [227] I. Snyman and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. B **75**, 045322 (2007).
- [228] K. Kechedzhi, V. I. Fal'ko, E. McCann, and B. L. Altshuler, Phys. Rev. Lett. **98**, 176806 (2007).
- [229] A. Misu, E. Mendez, and M. S. Dresselhaus, J. Phys. Soc. Jpn. **47**, 199 (1979).
- [230] R. E. Doezema, W. R. Datars, H. Schaber, and A. Van Schyndel, Phys. Rev. B **19**, 4224 (1979).
- [231] A. A. Abrikosov, *Fundamentals of the Theory of Metals*, Elsevier Science Publishers B. V., North-Holland, Amsterdam, 1988.
- [232] A. G. Moghaddam, M. Zareyan, arXiv:0804.2748v1 (2008).
- [233] J. E. Müller, Phys. Rev. Lett. **68**, 385 (1992).
- [234] J. Reijniers and F. M. Peeters, J. Phys.: Condens. Matter **12**, 9771 (2000); J. Reijniers, A. Matulis, K. Chang, F. M. Peeters and P. Vasilopoulos, Europhys. Lett. **59**, 749 (2002); A. K. Geim et al., Nature **390**, 259 (1997); H. Xu et al., Phys. Rev. B **75**, 205301 (2007).
- [235] A. De Martino, L. Dell'Anna, and R. Egger, Phys. Rev. Lett. **98**, 066802 (2007).
- [236] M Tahir and K Sabeeh, arXiv:0707.2871.
- [237] F. Guinea, M. I. Katsnelson, M. A. H. Vozmediano, arXiv:0707.0682.
- [238] N. Nemec and G. Cuniberti, Phys. Rev. B **74**, 165411 (2006).
- [239] H.W. Lee and D.S. Novikov, Phys. Rev. B **68** 155402
- [240] T. K. Ghosh, A. De Martino, W. Häusler, L. Dell'Anna, R. Egger, Phys. Rev. B **77**, 081404(R) (2008).
- [241] K. Wakabayashi, M. Fujita, H. Ajiki, and M. Sigrist, Phys. Rev. B **59**, 8271 (1999).
- [242] E. Schrödinger, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Phys. Math. Kl. **24**, 418 (1930).